



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAIBA
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

EMANUELLA FRANCISCA DE LACERDA VIEIRA

**CONTROLE INFERENCIAL EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO UTILIZANDO
REDES NEURAS ARTIFICIAIS DINÂMICAS**

**João Pessoa - PB
2018**

EMANUELLA FRANCISCA DE LACERDA VIEIRA

**CONTROLE INFERENCIAL EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO UTILIZANDO
REDES NEURAS ARTIFICIAIS DINÂMICAS**

Trabalho final de curso submetido à Coordenação
Curso de Engenharia Química da Universidade
Federal da Paraíba, como requisito parcial para
obtenção do título de bacharel em Engenharia
Química.

Orientador: Prof. Dr. Arioston Araújo de Moraes Júnior

**João Pessoa - PB
2018**

Catálogo na publicação
Seção de Catálogo e Classificação

V657c Vieira, Emanuella Francisca de Lacerda.

Controle inferencial em colunas de destilação
utilizando Redes Neurais Artificiais dinâmicas /
Emanuella Francisca de Lacerda Vieira. - João Pessoa,
2018.

63 f.

Orientação: Arioston Araújo Morais Junior.
Monografia (Graduação) - UFPB/CT.

1. Sensor virtual, etilbenzeno, coluna de destilação.
I. Morais Junior, Arioston Araújo. II. Título.

UFPB/BC


EMANUELLA FRANCISCA DE LACERDA VIEIRA

**CONTROLE INFERENCIAL EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO UTILIZANDO
REDES NEURAS ARTIFICIAIS DINÂMICAS**


Trabalho final de curso submetido à Coordenação Curso de Engenharia Química da
Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para obtenção do título de bacharel
em Engenharia Química.

Aprovado em 19 de Junho de 2018

BANCA EXAMINADORA


(Orientador - UFPB) Prof. Dr. Arioston Araújo de Moraes Junior


Engenheiro Químico Jonas Laedson Marinho da Silva Santos (Avaliador Externo)


Prof. Dr. Leopoldo Oswaldo Alcazar Rojas (Avaliador-UFPB)

“Contudo, seja qual for o grau a que chegamos, o que importa é prosseguir decididamente”.

(Fil 3,16)

AGRADECIMENTOS

A Deus, fonte e origem de toda a vida e força dos que Nele esperam, e a Maria Santíssima, doce Mãe da humanidade, pelo dom da vida e por todas as graças concedidas.

Aos meus pais, Cezar e Cláudia, por todo amor, orações, suor derramado, apoio, conselhos e ordens que me forjaram e por toda compreensão nos momentos de dedicação ao longo do curso.

Aos meus irmãos, Manoel e Maria Eduarda, por toda compreensão e companheirismo, e por sempre estarem me acolhendo nos fracassos e me apoiando nas vitórias. Meu agradecimento extensivo à toda minha família, Lacerda e Vieira, que me fazem ter tanto orgulho e felicidade de fazer parte dela.

Às minhas amigas da vida inteira, Rafaela, Heloísa, Lidie Anne, Bruna, Angélica e Amanda, que sempre se fizeram presentes e guardam minha história com um carinho especial.

Aos meus irmãos da Casa de Evangelização, com quem divido muitos dos meus finais de semana, que arrancam minhas melhores risadas, escutam minhas frases aleatórias, me levam para mais perto de Deus e me ajudam a amar a Igreja.

Um agradecimento especial ao meu padrinho Mons. Jaelson, que com seu silêncio e resiliência me dá exemplo e com sua sede de busca pelo conhecimento e pela verdade me ajuda a formar senso crítico.

Ao meu orientador, Prof. Arioston, que me acolheu, me confiou a oportunidade de desenvolver este trabalho, e tanto me ensinou durante os anos que me acompanhou. E, juntamente com o Prof. Arioston, a outros dois gigantes do LABMC, que hoje tenho a feliz oportunidade de tê-los em minha banca avaliadora, Prof. Leopoldo e Jonas, por todos os conselhos que levarei para a vida. E aos outros amigos do LABMC, com quem pude dividir tantas tardes e conversas, em especial Jéssica Oliveira.

Aos meus amigos Ambev, em especial meus gestores Jordanny e Jefferson, além do time Trade, que formam a profissional que sou hoje e me oferecem constantes ensinamentos e oportunidades de crescimento e tornam a louca rotina mais leve.

Ao Prof. Julio Rebouças, meu primeiro orientador na graduação, por toda a paciência, e por ter sido quem primeiro me ensinou a ser uma profissional com qualidade, e a todos os professores do DEQ pelos ensinamentos.

Aos meus amigos da turma de Engenharia Química 2013.1, por termos trilhado todo esse percurso juntos, toda a companhia nas noites mal dormidas, todo “eu só durmo quando tu acabar de estudar”, as inúmeras risadas e todas as vezes que nos compreendíamos sem nem mesmo dizer uma palavra. E, por último, mas não menos importante, à PROJEQ – Empresa Junior, a minha melhor experiência da graduação, que primeiro me formou como profissional para o mercado de trabalho e me deu amigos que levarei pra toda a vida.

RESUMO

A medição da variável composição em tempo real é de suma importância para o controle dos processos industriais, devido à necessidade do acompanhamento da qualidade final do produto e à possibilidade de aplicação de um sistema de controle efetivo. No entanto, uma série de obstáculos torna este objetivo impraticável, seja por razões nas quais o sensor adequado não exista ou por essas medições analíticas serem demasiadamente caras, como é o caso do analisador em linha de processos. Alguns modelos de identificação de sistemas são utilizados para inferência de variáveis químicas, dentre os quais se destacam as redes neurais artificiais (RNA), com os sensores virtuais estimando variáveis de difícil medição através de variáveis de entrada facilmente mensuráveis. Assim, o trabalho propõe uma metodologia para a construção de sensores virtuais implementados em *software* com o objetivo de estimar a composição de saída em um processo produtivo de etilbenzeno (EB) e utilizá-la no controle de processos. O processo de produção em questão mostrou-se interessante para o presente trabalho, haja vista a ocorrência de efeitos transientes nas composições de alta pureza nas correntes de topo e de base da segunda coluna de destilação. Além disso, a produção do etilbenzeno representa o início da cadeia produtiva do estireno, monômero que possui mercado amplo no Brasil e no mundo, demandando mais de 25 milhões de toneladas por ano mundialmente. Os resultados do trabalho vão desde o projeto da unidade até a construção dos sensores virtuais e proposta de controle. Logo, verificou-se que o balanço global da unidade apresentou resultados coerente com os da literatura, o algoritmo de seleção de variáveis mostrou-se eficiente, o sensor virtual utilizando redes neurais artificiais apresentou resultados satisfatórios e a estrutura de controle minimizou os efeitos transientes do processo.

Palavras-chaves: sensor virtual, simulação, coluna de destilação, seleção de variáveis, redes neurais, etilbenzeno.

ABSTRACT

The measurement of the composition variable in real time is of paramount importance for the control of the industrial processes, due to the need to follow the final quality of the product and to the possibility of applying an effective control system. However, a number of obstacles make this goal impractical, either for reasons where the appropriate sensor does not exist or because these analytical measurements are too expensive, such as the online process analyzer. Some models of system identification are used for inference of chemical variables, among which artificial neural networks (RNA), with virtual sensors estimating difficult-to-measure variables through easily measurable input variables. Thus, the work proposes a methodology for the construction of virtual sensors implemented in software with the objective of estimating the output composition in a productive process of ethylbenzene (EB) and use it in process control. The production process in question was interesting for the present work, considering the occurrence of transient effects in the compositions of high purity in the top and bottom streams of the second distillation column. In addition, the production of ethylbenzene represents the beginning of the production chain of styrene, a monomer that has a large market in Brazil and worldwide, requiring more than 25 million tons per year worldwide. The results of the work range from the design of the unit to the construction of virtual sensors and control proposal. Therefore, it was verified that the overall balance of the unit presented results consistent with those of the literature, the variable selection algorithm showed efficiency, the virtual sensor using artificial neural networks presented satisfactory results and the control structure minimized the transient effects of the process.

Keywords: virtual sensor, simulation, distillation column, variable selection, neural networks, ethylbenzene.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	15
1.1 OBJETIVOS	16
1.1.1 Objetivo Geral	16
1.1.2 Objetivos Específicos	16
 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	17
2.1 DESCRIÇÃO DO PROCESSO	17
2.2 SIMULADORES DE PROCESSOS QUÍMICOS	18
2.3 MODELAGEM MATEMÁTICA	18
2.3.1 Modelagem de Reatores Químicos Não Isotérmicos.....	18
2.3.2 Cinética da reação	19
2.3.3 Colunas de destilação	20
2.3.4 Modelagem de Processos de separação	21
2.3.4.1 Modelagem do Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV).....	21
2.3.4.2 Modelo de Estágio de Equilíbrio	25
2.4 MÉTODOS PARA MEDIÇÃO DE COMPOSIÇÃO	27
2.4.1 Medições atrasadas	25
2.4.2 Soft sensors	26
2.4.2.1 Modelos de identificação de sistemas aplicados a sensores virtuais	27
2.5 TÉCNICAS DE SELEÇÃO DE VARIÁVEIS	28
2.5.1 Todas as Regressões Possíveis	29
2.5.2 Regressão por etapas	30
2.5.3 Critérios estatísticos de avaliação	30
2.6 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	31
2.6.1 Estrutura de um neurônio artificial	31
2.6.2 Tipos de função de ativação	32
2.6.3 Arquitetura da rede neural	33
2.6.4 Aprendizagem e treinamento de uma RNA	35
2.6.5 Algoritmos de treinamento.....	36
2.6.5.1 Algoritmo backpropagation	36
2.6.5.2 Algoritmo de Levenberg-Maquardt	37
2.7 CONTROLE INFERENCIAL.....	37

3 METODOLOGIA	38
3.1 MODELAGEM DOS REATORES	40
3.2 SELEÇÃO DE VARIÁVEIS	40
3.3 TREINAMENTO DA REDE NEURAL.....	41
3.3.1 Algoritmo <i>backpropagation</i>	42
3.3.2 Modificações de Levenberg-Maquardt.....	44
3.3.3 Critério de Parada Empregado	46
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	47
4.1 MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO PRODUTIVO DO ETILBENZENO.....	47
4.1.1 Simulação em regime estacionário	49
4.1.2 Resultados em regime transiente	50
4.2 SELEÇÃO DE VARIÁVEIS	53
4.3 CONSTRUÇÃO E IMPLEMENTAÇÃO DO SENSOR VIRTUAL	54
4.3.1. Treinamento <i>off-line</i> da RNA	54
4.4 IMPLEMENTAÇÃO DO CONTROLE INFERENCIAL	58
5 CONCLUSÕES	59
6 BIBLIOGRAFIA	61

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Esquema do processo produtivo do etilbenzeno.....	16
Figura 2 - Esquema de uma coluna de destilação.....	19
Figura 3 - Esquema de um prato j para desenvolvimento da modelagem matemática.....	22
Figura 4 - Esquema de resolução por laços das equações MESH.....	24
Figura 5 - Sensor virtual implementado em software para inferência de variáveis.....	25
Figura 6 - Esquema geral dos modelos de identificação.....	26
Figura 7 - Neurônio artificial.....	31
Figura 8 - Gráficos das principais funções de ativação.....	32
Figura 9 - Representação de rede de uma única camada.....	33
Figura 10 - Representação de uma rede de múltiplas camadas.....	34
Figura 11 - Rede neural recorrente de Elman.....	35
Figura 12 - Diagrama de blocos de um <i>softsensor</i> utilizado para controle inferencial.....	37
Figura 13 - Metodologia empregada no desenvolvimento do trabalho para construção dos sensores virtuais e controle do processo.....	38
Figura 14 - Esquema das correntes do primeiro reator da planta de etilbenzeno.....	38
Figura 15 – Esquema das correntes do segundo reator da planta de etilbenzeno.....	39
Figura 16 - Etapas do algoritmo TRP.....	40
Figura 17 - Etapas do algoritmo de regressão por etapas.....	41
Figura 18 - Algoritmo de treinamento da rede neural artificial.....	42
Figura 19 – Estrutura de um neurônio multicamadas.....	42
Figura 20. Etapas do algoritmo de treinamento.....	45
Figura 21. Fluxograma do processo produtivo do EB implementado no simulador.....	46
Figura 22 - Simulação do processo produtivo do etilbenzeno.....	48
Figura 23 - Perfis de composição molar nas colunas de destilação C1 e C2.....	49
Figura 24. Respostas da composição de EB no topo para perturbações em C2.....	50
Figura 25. Respostas da composição de DEB na base da coluna 2 a perturbações.....	51
Figura 26 a, b, c, d - Ajuste dos dados em cada etapa da rede neural.....	55
Figura 27. a) Sensor Virtual Neural do XCCl_4 e Saída do Simulador (Teste); b) Sensor Virtual Neural do XCCl_4 e Saída do Simulador (Validação Cruzada).....	56
Figura 28 - Sensor Virtual Neural dinâmico do X_{EB} e Saída do Simulador.....	56

Figura 29 - Esquema do controle de composição através da medição da rede neural.....	57
Figura 30 - Controle de composição usando diferentes estratégias.....	58

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Cinética de reação do etilbenzeno.....	18
Tabela 2 - Lista de variáveis candidatas para seleção.....	51
Tabela 3 - Melhores conjuntos de variáveis secundárias.....	52
Tabela 4 - Topologias das RNA avaliadas para construção dos sensores virtuais.....	54
Tabela 5 - Dados da RNA com melhor resultado off-line para inferência de composição.....	55

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

EB	Etilbenzeno
DEB	<i>Dietilbenzeno</i>
SI	Sistemas Inteligentes
RNA	Redes Neurais Artificiais
TRP	Todas as Regressões Possíveis
SQR	Soma quadrática dos resíduos
ELV	Equilíbrio líquido-vapor
F_2	Vazão de alimentação da segunda coluna de destilação
D_2	Vazão de topo da segunda coluna de destilação
B_2	Vazão de base da segunda coluna de destilação
MLP	Multilayer Perceptron
PRBS	Sinais pseudo-randômico-aleatórios
CSTR	Continuous Stirred Tank Reactor
Q_2	Carga térmica do refeedor da segunda coluna de destilação
R_2	Vazão de refluxo da segunda coluna de destilação
T_{20}	Temperatura do estágio 20
UNIFAC	<i>Universal Quasi Chemical Functional group Activity Coefficients</i>
UNIQUAC	<i>Universal Quasi Chemical</i>
α_i	Volatilidade relativa do componente i em relação ao j
y	Fração molar da fase vapor
x	Fração molar da fase líquida
μ_i^L	Potencial químico do componente i na fase líquida
μ_i^V	Potencial químico do componente i na fase vapor
P_i^S	Pressão de vapor
γ_i	Coefficiente de atividade
P	Pressão total do sistema
σ_i	Coefficiente de fugacidade

1 INTRODUÇÃO

As indústrias modificam e melhoram suas tecnologias quando são requeridas em aumentar sua produtividade, condições efetivas de segurança, índices de eficiência e a qualidade final do produto. Nesse contexto, a importância do monitoramento de variáveis críticas de processos utilizando dispositivos de medição adequados é evidente. Para acompanhamento em tempo real de variáveis físicas de processos químicos indústrias são utilizados inúmeros sensores físicos. Entretanto, quando se deseja medir, em tempo real, variáveis químicas ou bioquímicas não facilmente mensuráveis, tais como composição dos produtos de colunas de destilação, surgem obstáculos de como efetuar-las: inexistência de medição, seu custo elevado ou ausência de medição em tempo real (FORTUNA et al., 2007). Assim, este trabalho propõe uma metodologia de construção de sensores virtuais usando modelos de inferência para as medições de composição através de redes neurais artificiais (RNA) como alternativas viáveis para superar estas e outras dificuldades apresentadas.

Alguns modelos de identificação de sistemas são utilizados para inferência de variáveis químicas, dentre os quais se destacam as redes neurais artificiais (RNA). A solução de problemas através de RNA é bastante atrativa, haja vista a sua característica principal: o paralelismo. Essa característica assemelha-se à maneira como o cérebro lida com as informações recebidas por seus neurônios e, assim, cria a possibilidade de um desempenho superior em relação a solução de problemas baseados em modelos estatísticos lineares e fenomenológicos convencionais.

O conhecimento a priori do processo (“*feeling*” de engenharia) não pode e não deve ser descartado, mas por si só não é o suficiente para selecionar algumas variáveis secundárias de entrada importantes para a construção dos sensores virtuais. Nesse caso, recorre-se comumente a técnicas de seleção de variáveis, a exemplo da análise estatística multivariada (busca exaustiva e sequencial) e métodos baseados em inteligência artificial (por exemplo, o algoritmo genético).

O objeto de estudo é uma planta química de produção de etilbenzeno (EB), composto químico aromático em estado líquido a temperatura ambiente e altamente inflamável, se apresenta como uma grande commodity química. Sua produção representa o início da cadeia produtiva do estireno, monômero que possui mercado amplo, com demanda de mais de 25 milhões de toneladas por ano em todo o mundo. No Brasil, o consumo é de 600 mil toneladas de estireno por ano, sendo boa parte transformado em poliestireno, com cerca de 32% absorvida pelas indústrias de descartáveis (copos), 22% com as indústrias de linha branca, 16% destinados à embalagens de alimentos congelado, e os outros 30% ficam com as indústrias de

eletroeletrônicos e automobilística. Em menor escala, é utilizado pelas indústrias de tintas e em resinas de poliéster (MINURA e SAITO, 2000).

Sendo assim, a produção de estireno necessita ser sustentada por uma produção robusta da sua matéria-prima, o etilbenzeno, para suprir a crescente demanda do mercado mundial. Este, por sua vez, deve manter qualidade e pureza porque a formação de estireno é comprometida quando há contaminantes como tolueno e benzeno na desidrogenação catalítica do EB, o que desencadeia reações secundárias que comprometem o rendimento reacional.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo Geral

O objetivo desse trabalho consiste na construção de sensores virtuais utilizando redes neurais artificiais através do software *Matlab*® para inferência das composições de topo e base da segunda coluna de destilação do processo produtivo do etilbenzeno, modelado no *Aspen Dynamics*®.

1.1.2 Objetivos específicos

- Simular um processo industrial com reatores e torres de destilação no simulador dinâmico *Aspen Dynamics*™, agregando conhecimentos sobre termodinâmica, fenômenos de transporte, dimensionamento de equipamentos, simulação dinâmica, otimização e controle de processos químicos;
- Desenvolver um algoritmo matemático no software *Matlab*®, com o objetivo de testar RNA dinâmicas multicamadas para estimativa de composição;
- Efetuar a comunicação entre os softwares *Aspen Dynamics*™ e o *Simulink-Matlab*®, através do bloco de comunicação dinâmica *AMSIMULATION-Simulink*®.
- Efetuar o treinamento da RNA em tempo real, propor um controle realimentação e comparar a estimativa com a simulação de um analisador em linha de processos (medição analítica em tempo real).

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

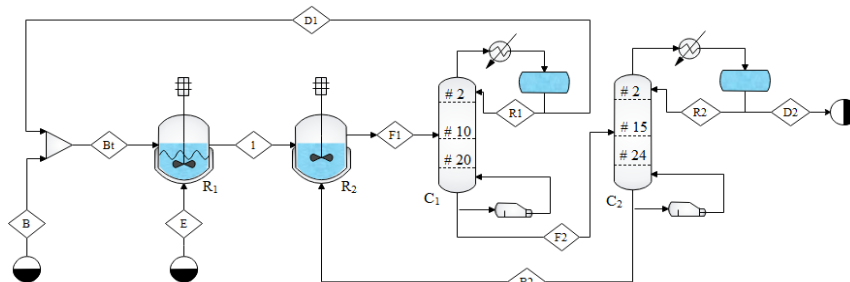
2.1 DESCRIÇÃO DO PROCESSO

A expansão da produção de etilbenzeno (EB) como matéria-prima para o estireno foi provocada especialmente pela grande demanda de borracha de butadieno sintético (SBR), durante a Segunda Guerra Mundial, o que provocou melhorias tecnológicas aceleradas e alta expansão de capacidade em um curto espaço de tempo. Este enorme esforço no tempo de guerra levou à construção de várias fábricas de larga escala, transformando a produção de estireno rapidamente em uma indústria gigante.

Atualmente, quase todo o EB é produzido comercialmente por alquilação de benzeno com etileno, principalmente através de duas rotas: na fase líquida com catalisador de cloreto de alumínio, ou na fase de vapor com um catalisador de zeólita sintética desenvolvido pela Mobil Corporation. Além de toda a importância econômica, o processo mostrou-se interessante para o presente trabalho, haja vista a ocorrência de efeitos transientes nas composições de alta pureza das correntes de topo e de base da segunda coluna de destilação.

Na rota em estudo, o etilbenzeno (EB) é produzido em dois reatores CSTR em série, a partir da reação do etileno (E) e o benzeno (B). Nesse processo, ocorre também a formação do composto dietilbenzeno (DEB), originado da reação secundária entre o EB e o B. O processo é constituído de dois reatores e duas colunas de destilação, como mostra a Figura 1. A saída do segundo reator do processo é corrente de alimentação da primeira coluna de destilação multicomponente, sendo seu composto “a chave leve” o benzeno (>99,9% molar) reciclado para o primeiro reator do processo. A segunda coluna de destilação tem como alimentação a corrente de base da primeira coluna, fornecendo uma corrente de topo rica em EB (>99,9% molar) e uma corrente de base rica no DEB (>99,9% molar), sendo essa última corrente de reciclo para o segundo reator.

Figura 1. Esquema do processo produtivo do etilbenzeno



Fonte: Mariz (2017).

Como visto anteriormente, a produção de EB requer alta pureza para garantir bom rendimento na produção do produto final, o estireno. Para isso, é necessário rígido sistema de controle de composição que, por sua vez, necessita de uma medição precisa e instantânea para atuar corretamente sobre o processo. Sistemas de medição tradicionais fornecem atraso significativo na medição, como é o caso da cromatografia, como cromatografia ou são muito dispendiosos, como o analisador em linha. Assim, o sensor virtual é garantia de alternativa eficiente e economicamente viável para o bom rendimento e pureza do processo do EB.

2.2 SIMULADORES DE PROCESSOS QUÍMICOS

Um sistema pode ser descrito através de modelos fenomenológicos que utilizam leis físicas e correlações, além das variáveis de estado, que descrevem o processo a partir de propriedades como quantidade de massa, energia e momento linear, sendo a relação entre elas determinadas pelos balanços e outras equações constitutivas (LUYBEN, 1999).

Diante de dificuldades na construção modelos físicos de processos mais robustos, como é o caso de colunas de destilação e alguns reatores, que possuem dinâmica muito complexa e grande número de componentes que geram alto número de equações não lineares, os ambientes simuladores de processo surgem como alternativa capaz de modelar e simular a partir de condições especificadas pelo usuário (SEADER et al., 2016).

Assim, nesta seção descreve-se a modelagem matemática usada pelos *softwares Aspen Plus e Dynamics™* para os principais equipamentos do processo.

2.3 MODELAGEM MATEMÁTICA

2.3.1 Modelagem de Reatores Químicos Não Isotérmicos

Os reatores de mistura contínua ou CSTR (*Continuous Stirred Tank Reactor*) são geralmente modelados como não tendo nenhuma variação de espaço na concentração ou taxa de reação ao longo do recipiente. Assim, segue-se, de modo geral, o esquema para o balanço de massa não-isotérmico (Equação 1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de acúmulo} \\ \text{de mols de } A_j \\ \text{no reator} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{alimentação} \\ \text{de } A_j \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{retirada} \\ \text{de } A_j \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de formação} \\ \text{ou consumo de } A_j \\ \text{no reator} \end{array} \right\} \quad (1)$$

Ou seja, em termos de concentração molar para um componente A (Equação 2):

$$\frac{dn_A}{dt} = F_E x_{AE} - F_S x_{AS} + r_A V \quad (2)$$

Da mesma forma, tem-se o balanço de energia (Equação 3):

$$\rho V C_V \frac{dT}{dt} = Q + \sum_{i=1}^e F_e H_e - \sum_{i=1}^s F_s H_s + \sum_{i=1}^n r_i (-\Delta H_i) \quad (3)$$

Onde: n_A é a vazão molar do componente A; F_e e F_s as vazões de entrada e saída, respectivamente; H é a entalpia, ρ a densidade, C_V a capacidade térmica a volume constante e r_A a velocidade da reação.

2.3.2 Cinética da reação

A produção de EB envolve a reação em fase líquida entre o etileno e o benzeno, descrita pela Equação 4:



Ocorrem também algumas reações indesejáveis, dentre as quais está a principal: a formação do DEB, conforme Equação 5:



Além disso, O DEB reage com o benzeno e, novamente, forma o EB, sendo possível reciclar o DEB que sai do segundo reator para aumentar a produção, Equação 6:



A Tabela 1 a seguir mostra a cinética de reação, obtida em Luyben (2011). Vale salientar que a energia de ativação da reação indesejável é maior do que a da reação desejável, logo, temperaturas mais baixas favorecem a formação de EB no segundo reator.

Tabela 1 - Cinética de reação do etilbenzeno

Reação 1 (Equação 1)	Reação 2 (Equação 2)	Reação 3 (Equação 3)
----------------------	----------------------	----------------------

K	$1,528 \times 10^6$	$2,778 \times 10^7$	1000
E (cal/mol)	17 000	20 000	15 000
C (kmol/m ³)	$C_E C_B$	$C_E C_{EB}$	$C_B C_{DEB}$

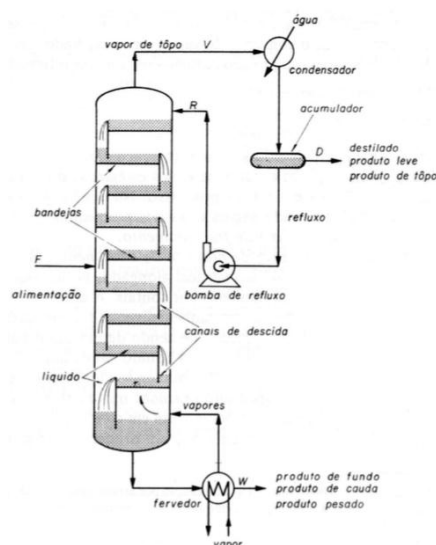
Fonte: LUYBEN (2011).

2.3.3 Colunas de destilação

A destilação é um processo de separação dos compostos de uma solução, que depende da distribuição de vários componentes entre as fases líquida e vapor, esta última criada a partir da vaporização da fase líquida até seu ponto de bolha. É baseado na diferença de volatilidade dos seus constituintes, com a composição das fases vapor e líquido em equilíbrio no ponto de bolha do líquido (GEANKOPLIS, 1993).

Na coluna de destilação, a fase líquida em contato com a fase vapor a uma dada temperatura e pressão, viabiliza a transferência de massa entre as fases. Ela possui pratos que permitem maior contato entre as fases, o que intensifica a transferência de massa e calor. A figura abaixo apresenta uma coluna de destilação, constituída de pratos, condensador no topo, que condensa o vapor que deixa o topo da coluna, e refeedor na base, além do vaso de refluxo junto ao condensador, que permite armazenar o vapor condensado e bombear parte dele de volta para coluna, conforme esquema da Figura 2:

Figura 2 - Esquema de uma coluna de destilação



Fonte: GOMIDE, 1988

A coluna neste trabalho é caracterizada como um sistema com restrições, não estacionário, não linear e de alta pureza.

2.3.4 Modelagem de Processos de separação

2.3.4.1 Modelagem do Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV)

A separação de componentes químicos através da destilação é baseada no equilíbrio de fases, em geral o equilíbrio líquido-vapor (ELV), e parte do princípio da diferença entre as composições de equilíbrio das fases líquida e vapor (GEANKOPLIS, 1993; LUYBEN, 2013).

No equilíbrio, as fugacidades de um componente i no vapor e no líquido são iguais, o que é descrito pela Equação 7 (KORESTKY, 2007):

$$f_i^L(T, P, \underline{x}) = f_i^V(T, P, \underline{y}) \quad (7)$$

Onde: subscrito L refere-se a fase líquida e o V, ao vapor.

Neste trabalho, a fase vapor foi considerada ideal devido à pressão de operação das colunas, próxima do vácuo, e a não-idealidade da fase líquida utilizando o coeficiente de atividade. Diz-se, então, que foi utilizada a modelagem $\gamma - \phi$, conforme apresentado nas Equações 8 e 9 abaixo (SANDLER, 2006).

$$f_i^L(T, P, \underline{x}) = x_i P_i^{sat}(T) \cdot \phi_i^{L,sat}(T, P, \underline{x}) \cdot \gamma_i(T, P, \underline{x}) \quad (8)$$

$$f_i^V(T, P, \underline{y}) = y_i \cdot P \cdot \phi_i^V(T, P, \underline{y}) \quad (9)$$

Considerando o caso de baixas pressões, tem-se, para uma espécie, a Equação 10, que mostra a relação entre as composições de líquido e vapor coexistentes.

$$x_i P_i^{vap}(T) \cdot \gamma_i(T, P, \underline{x}) \cdot \left(\frac{f}{P}\right)_{sat,i} = y_i \cdot P \cdot \left(\frac{f}{P}\right)_i \quad (10)$$

Para todas as espécies, tem-se a Equação 11:

$$\sum_{i=1}^C x_i P_i^{vap}(T) \cdot \gamma_i(T, P, \underline{x}) \cdot \left(\frac{f}{P}\right)_{sat,i} = P \sum_{i=1}^C y_i \cdot \left(\frac{f}{P}\right)_i \quad (11)$$

Seja a pressão total e a pressão de vapor de cada componente suficientemente baixas, sendo negligenciadas as correções para o coeficiente de fugacidade, além de considerar todas as forças intermoleculares aproximadamente iguais, temos, pela Equação 12:

$$\sum x_i P_i^{vap}(T) \gamma_i(T, P, \underline{x}) = P \sum y_i \quad (12)$$

Podemos tratar, então, o vapor como gás ideal e o líquido como solução ideal. Para a fugacidade do componente puro, temos, Equação 13:

$$x_i P_i^{vap} \gamma_i = P y_i \quad (13)$$

Torna-se possível, então, calcular o equilíbrio líquido-vapor a partir das variáveis mensuráveis γ_i e P_i^{vap} . O coeficiente de atividade é frequentemente obtido por modelos baseados no cálculo da energia livre de Gibbs em excesso, segundo Equação 11.

$$\ln \gamma_i = \frac{G^E}{RT} = f(x_1, x_2, \dots) \quad (14)$$

Já a pressão de vapor de todos os componentes, dada em função da temperatura (T), pode ser calculada pela equação de Antoine estendida (Equação 15), que é utilizada pelo simulador Aspen PlusTM:

$$P_i^{vap} = f(T) \rightarrow \ln P_i^{vap} = A - \frac{B}{T + C} + DT + E \ln T \quad (15)$$

(A, B, C, D, E são constantes que variam de acordo com a substância e T é a temperatura absoluta, em Kelvin).

O modelo termodinâmico utilizado para o cálculo dos coeficientes foi o modelo semi-empírico proposto por Chao-Seader (1961), indicado para o processo em estudo por LUYBEN (2011). Podendo ser aplicado para misturas de hidrocarbonetos leves, fornecendo valores razoáveis nas regiões de vapor e líquido (KORESTKY, 2007), é baseado no método de resolução de Newton-Raphson, que lineariza a função no ponto atual.

A equação de estado considera uma correção devido ao tamanho das moléculas em relação ao gás ideal. Assim, na Equação 16 abaixo, o primeiro termo após a igualdade representa o coeficiente de fugacidade do líquido puro, e o segundo termo, um fator de correção relacionado ao desvio do gás real das propriedades do gás puro:

As equações MESH obtidas são apresentadas nas Equações 17 a 24, considerando o estado estacionário.

- Equações M: Balanço de massa para o componente i no prato j (C equações para cada estágio):

Sabendo que $i=1, 2, \dots, C$ e $j=1, 2, \dots, N$.

$$M_j = F_j + L_{j-1} + V_{j+1} - (L_j + U_j) - (V_j + W_j) = 0 \quad (17)$$

$$M_j = F_j z_{i,j} + L_{j-1} x_{i,j-1} + V_{j+1} y_{i,j+1} - x_{i,j} (L_j + U_j) - y_{i,j} (V_j + W_j) = 0 \quad (18)$$

- Equação E: Relações de equilíbrio de fases (C equações para cada estágio):

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j} x_{i,j} = 0 \quad (19)$$

- Equação S: Somatório das frações molares, sendo uma equação para cada estágio:

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^C y_{i,j} - 1 = 0 \quad (20)$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^C x_{i,j} - 1 = 0 \quad (21)$$

- Equação H: Balanço de energia no prato j , sendo uma equação para cada estágio:

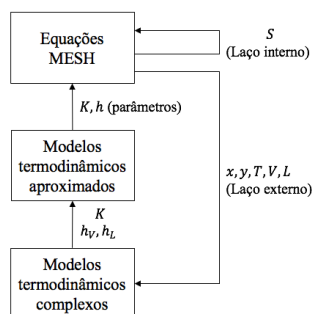
$$h_j = F_j h_{F,j} + L_{j-1} h_{L,j-1} + V_{j+1} h_{V,j+1} - (L_j + U_j) h_{L,j} - (V_j + W_j) h_{V,j} - (ou +) Q_j = 0 \quad (22)$$

Quanto aos graus de liberdade do sistema, as equações MESH nos fornecem o número de equações $N(2C + 3)$, sendo desconhecidas as variáveis $x_{i,j}$, $y_{i,j}$, L_j , V_j e T_j , além das cargas térmicas do condensador e do refeedor. Temos N e todas as variáveis F_j , $z_{i,j}$, $T_{F,j}$, $P_{F,j}$, P_j , U_j , W_j e Q_j especificadas, além dos termos de acúmulo zerados. Devido a isso, temos $N(2C + 3) + 2$ variáveis e com isso o sistema está indeterminado. Para que um sistema como a coluna de destilação com condensador acoplado se torne possível e determinado, é necessária a especificação de 2 (dois) graus de liberdade, de modo a ter-se que especificar duas variáveis ou arranjar duas equações para solucionar o problema (SEADER, 2011).

Os cálculos da coluna são feitos pelo simulador com o algoritmo *inside-out*, através de dois *loops*: um externo e outro interno, conforme Figura 4. As propriedades termodinâmicas são calculadas no laço externo, com um grupo aproximado de equações empíricas utilizado para

convergir o laço interno, e um rigoroso e complexo grupo de equações utilizado ao menos uma vez no laço externo. Já as equações MESH são calculadas no laço interno, que recebe os resultados do laço externo e os envia novamente para atualização.

Figura 4 - Esquema de resolução por laços das equações MESH



Fonte: Adaptada de SEADER et al. (2011).

2.4 MÉTODOS PARA MEDIÇÃO DE COMPOSIÇÃO

2.4.1 Medições atrasadas

Dois aspectos se destacam quando se trata de modernidade aliada à engenharia e às plantas industriais: o avanço tecnológico aprimora métodos de monitoramento e controle automático do processo, ao passo que a sociedade se torna mais exigente com relação à qualidade dos produtos, emissão de poluentes e minimização de perdas. Quando se trata de métodos tradicionais de medição usados no controle de composição, tais aspectos ainda não são muito marcantes. Assim, os sensores virtuais aparecem nesse cenário como alternativa que une economia e qualidade final do produto.

Entre as técnicas tradicionais de medição de composição, destacam-se a análise em laboratório e a análise em linha de processo. Na primeira, são enviadas amostras dos produtos em laboratório duas a três vezes por dia, e, se há um desvio maior que a precisão no resultado, são tomadas decisões de atuar no processo para corrigir os desvios. Porém, o atraso entre a coleta da amostra e o resultado do laboratório pode chegar a horas, dificultando a escolha das melhores ações de controle, além de não permitir a inclusão de informações sobre a qualidade dos produtos em um sistema automático de controle em tempo real (CAMPOS et al., 2013) e estar sujeita a erros experimentais externos aos da linha de processo.

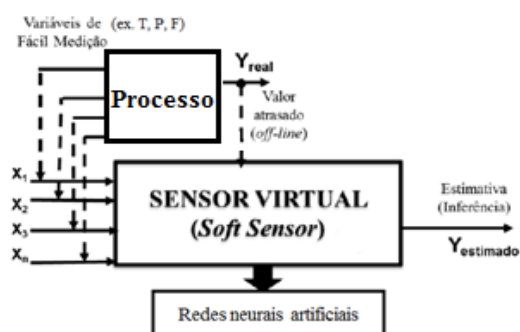
Já os analisadores em linha são equipamentos instalados na própria linha de processo, medindo a variável analítica desejada. É mais preciso e possui tempo de amostragem bem menor que a técnica de laboratório (cerca de 8 min), porém necessita de alto custo de instalação

e manutenção, com técnico capacitado e disponível para a manutenção do sistema, previsão de materiais de consumo e peças de reposição (COHN, 2004; MENEGUELO, 2007).

2.4.2 *Soft sensors*

Os sensores virtuais surgem como alternativa a essas e outras dificuldades apresentadas, e são algoritmos matemáticos implementados em software, utilizados principalmente para inferência de variáveis não facilmente mensuráveis, a partir de variáveis secundária de fácil medição, tais como medições físicas (MORAIS JR, 2015). Esta alternativa surge de uma dificuldade operacional ou do alto custo de obtenção da variável desejada, por exemplo, estimar composições de correntes de produto de destilação, ou até mesmo a apresentação de falhas de medições, quebras e manutenção dos sensores físicos. A configuração de um sensor virtual implementado em software é apresentada de acordo com a Figura 5.

Figura 5 - Sensor virtual implementado em software para inferência de variáveis



Fonte: adaptado de MORAIS JR (2015).

O fato de que seres humanos são aptos a conduzir tarefas complexas sob significativa incerteza tem estimulado pesquisas por padrões alternativos de modelagem, como as técnicas de sistemas inteligentes (SI) ou inteligência artificial. Os SI são metodologias que empregam técnicas motivadas por sistemas biológicos e inteligência humana no desenvolvimento de modelos de sistemas dinâmicos. Dessa forma, eles vêm sendo empregados em modelos de construção de sensores virtuais, dentre as quais se destacam as redes neurais artificiais (RNA).

Além de terem um baixo custo quando comparado com outras formas de medição como os analisadores em linha, podem ser implementados em um *hardware* existente, por exemplo, micro-controladores, e podem ser adaptados em casos de mudanças de parâmetros de sistema. Permitem a estimativa de dados, em tempo real, superando os atrasos introduzidos pelos sensores de *hardware* com respostas lentas, por exemplo, cromatógrafos gasosos. Por isso é

que também são chamados *soft sensors*: são programas de computador que fornecem informações semelhantes aos sensores tradicionais, os *hardwares*.

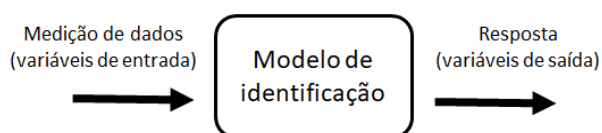
A estimativa através do sensor virtual pode ser feita utilizando-se um modelo matemático do processo ou um conjunto de dados das variáveis de entrada de fácil medição obtidas na própria planta, como temperatura, pressão e vazões. Isso se deve ao fato de que os estados de muitas das variáveis de entrada “secundárias” refletem os estados de variáveis complexas destes processos, pela própria natureza dos processos químicos e sistemas de engenharia de processo. Com isso, variáveis facilmente mensuráveis são amplamente utilizadas para estimar grandezas representativas de parâmetros de qualidade dos produtos, como composições, em uma frequência de coleta de dados suficiente para que seus resultados possam ser utilizados por um controlador que toma ações a cada um ou dois minutos (CAMPOS et al., 2013).

Assim, o sensor virtual deve aliar o conhecimento teórico obtido através do modelo matemático implementado com o conhecimento prático advindo das informações em tempo real transmitida pelas variáveis de entrada, podendo estimar a variável de saída desejada.

2.4.2.1 Modelos de identificação de sistemas aplicados a sensores virtuais

A identificação de sistemas é o ramo da engenharia que utiliza da medição de dados para construção de modelos matemáticos, através do projeto de ferramentas computacionais e estudo de métodos capazes de representar a dinâmica do sistema, como mostrado na Figura 6. Três etapas são inerentes ao processo de identificação: determinação da estrutura, estimação dos parâmetros e validação do modelo (AGUIRRE, 2004).

Figura 6 - Esquema geral dos modelos de identificação



Fonte: Própria autora (2018).

A formulação dos modelos pode dispor de três tipos de estruturas:

- Modelagem caixa-branca: também chamada de modelagem fenomenológica ou conceitual, é baseada nas teorias das equações dos princípios de conservação, ou seja, no equacionamento dos fenômenos envolvidos;
- Modelagem caixa-preta: modelagem baseada em técnicas de identificação de sistemas que busca relações de causa e efeito entre as entradas e saídas do processo, como é o caso de técnicas de construção de sensores virtuais, a exemplo de análise multivariada, técnicas de filtragem e sistemas inteligentes. É geralmente utilizada quando o sistema é muito complexo e há dificuldades em descrever o processo através de suas equações constitutivas.
- Modelagem caixa-cinza: combina as duas técnicas anteriores, utilizando os modelos por analogia.

2.5 TÉCNICAS DE SELEÇÃO DE VARIÁVEIS

Para a construção de um modelo de inferência, é importante selecionar um conjunto adequado de variáveis que inclua provavelmente todas as mais importantes, ou seja, é preciso filtrar quais dentre as entradas do processo mais influenciam na variável resposta desejada. Para isso, utiliza-se de técnicas de seleção de variáveis, técnicas de busca que têm o objetivo de encontrar a melhor equação de regressão, ou seja, o melhor subconjunto de variáveis quando existe um grande número de variáveis candidatas.

Nos processos químicos, o estado de muitas variáveis de entrada reflete no estado de muitas variáveis complexas. Porém, a escolha das variáveis de entrada não basta ser feita apenas através do conhecimento teórico e fenomenológico retratados nos regimes estacionário e transiente, porque algumas variáveis podem ser interdependentes ou a influência pode se manifestar apenas em algumas regiões do processo (KANO et al, 2009). É necessário, também, que as entradas a serem selecionadas sejam variáveis facilmente medidas em linha, chamadas secundárias, a exemplo de temperatura, pressão e fluxos.

A seleção de variáveis que farão parte do modelo é realizada comparando-se os modelos oriundos das combinações das variáveis disponíveis. A comparação deve ser feita sistematicamente, e, assim, dispõe-se de critérios de avaliação desenvolvidos para avaliar, comparar e quantificar o ajuste do modelo aos dados experimentais disponíveis.

A qualidade da inferência depende diretamente da qualidade dos dados coletados, por isso a coleta de dados mostra-se como uma das etapas mais importantes do processo de seleção. Encontrar este subconjunto de variáveis regressoras envolve dois objetivos opostos: quer-se o modelo de regressão para ser o mais completo e realista possível, com cada regressor que seja remotamente relacionado à variável dependente a ser incluída, porém, quer-se incluir o menor número possível de variáveis porque cada regressor irrelevante diminui a precisão dos coeficientes estimados e dos valores previstos. Além disso, a presença de variáveis extras aumenta a complexidade da coleta de dados e manutenção do modelo, além de representar ruído ou perturbação para o sistema (ZAMPROGNA et al., 2002).

Dentre as metodologias existentes, destacam-se aqui os métodos de busca exaustiva e os métodos sequenciais ou *stepwise*. A busca exaustiva testa todas as combinações possíveis para um conjunto de entradas candidatas, gerando um modelo para cada subconjunto de variáveis, que é avaliado através dos critérios citados anteriormente. Já os métodos sequenciais avaliam um menor subconjunto de variáveis (MONTGOMERY e RUNGER, 2014) através da avaliação do efeito da adição ou retirada sequencial de variáveis.

2.5.1 Todas as Regressões Possíveis (TRP)

Método de busca exaustiva que necessita do ajuste de todas as equações de regressão envolvendo 1, 2, ..., n variáveis candidatas. Considere um modelo de regressão linear múltipla e suas suposições, Equação 23:

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_p x_p \quad (23)$$

Este método dá ao analista a máxima quantidade de informações disponíveis sobre a natureza das relações entre os conjuntos de X e Y. Uma maneira eficiente de usar os resultados do algoritmo TRP é escolher os três "melhores" modelos, baseado nos critérios estatísticos de avaliação, contendo um número específico de variáveis. Este subconjunto menor de equações é então analisado para chegar no modelo final. Essas regressões são cuidadosamente com relação aos *outliers* ou a necessidade de transformações antes da decisão sobre o modelo final (CHATTERJEE & HADI, 2012).

Vale salientar que a cada K regressores, serão gerados 2^K equações de regressão contendo as variáveis, e, à medida que aumentam os candidatos, o número de equações aumenta rapidamente: dobra a cada adição de uma nova variável candidata. Por isso, não é recomendado quando o número de regressores seja razoavelmente grande (MONTGOMERY e RUNGER, 2014).

2.5.2 Regressão por Etapas (Stepwise Regression)

É uma técnica largamente utilizada na seleção de variáveis, cujo procedimento iterativo desenvolve uma sequência de modelos pela adição ou retirada de candidatos regressores a cada etapa, levando em consideração a influência da entrada ou saída de cada variável no modelo. É um processo semi-automatizado de construção de um modelo, adicionando ou removendo sucessivamente variáveis baseado unicamente nas estatísticas t de seus coeficientes estimados, sendo especialmente útil para peneirar grandes quantidades de variáveis independentes potenciais e ajustando um modelo.

O critério mais utilizado para avaliar a necessidade de adição ou remoção de regressores em cada etapa é o teste F parcial, conforme Equação 24:

$$F_j = \frac{SQR(\beta_2, \beta_0)}{MQE(x_1, x_2)} \quad (24)$$

Sendo SQR a soma quadrática dos resíduos e MQE a média quadrática do erro.

2.5.3 Critérios Estatísticos de Avaliação

O procedimento de seleção pode ser avaliado como um problema de otimização, já que o objetivo consiste na maximização ou minimização de critérios de avaliação, tais como: coeficiente de determinação ajustado ou R^2_{aj} (Equação 25), erro quadrático médio ou MQE, que é definido como a média quadrática da diferença entre o valor estimado e o valor real dos dados (Equação 26), além da estatística Cp, que é uma medida do erro quadrático médio total para a regressão (Equação 27). Assim, a determinação do modelo mais ajustado aos dados é feita utilizando-se os índices de ajuste.

$$R^2_{ajust} = 1 - \left(\frac{n-1}{n-p} \right) (1 - R^2) \quad (25)$$

$$MQE = \frac{SQE}{(n-p)} \quad (26)$$

$$Cp = \left(\frac{SQE(p)}{\sigma^2} \right) - n - 2p \quad (27)$$

Sendo σ^2 a variância, R^2 o coeficiente de determinação, n é o número de variáveis e p , o número de amostras, e SQE a soma quadrática do erro, dada pela média dos desvios dos dados originais (y_i) e os fornecidos pelo modelo (\hat{y}_i), segundo a Equação 28:

$$SQE = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (28)$$

2.6 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

As redes neurais artificiais são processadores dotados de unidades de processamento simples que armazenam conhecimento adquirido experimentalmente através de aprendizagem e tornam-o disponível para uso (HAYKIN, 2001). Essas duas características fazem delas modelos computacionais que se assemelham em estrutura e funcionamento ao sistema nervoso dos seres vivos.

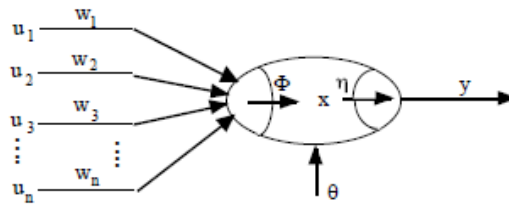
Esses sistemas inteligentes realizam tarefas complexas que combinam conhecimento real e técnicas, com conhecimentos humanos em áreas específicas, com capacidade de se adaptar, aprender e melhorar em ambientes de constante mudança, tomando decisões e atuando no sistema. (JANG et al., 1997).

As RNA's requerem baixa carga computacional e podem fornecer uma representação precisa do comportamento do processo, devido à sua capacidade de aprendizagem e generalização. Assim, a rede é capaz de produzir saídas adequadas, mesmo para entradas que não estavam presentes no processo de treinamento. Outras características importantes são a capacidade de auto-organização e processamento temporal, além da não-linearidade que, aliadas às citadas anteriormente, fazem delas uma ferramenta computacional extremamente poderosa e atrativa para a solução de problemas complexos.

2.6.1 Estrutura de um neurônio artificial

Um neurônio é a unidade de processamento de informação básica para o funcionamento de uma rede neural, que por sua vez consiste de uma estrutura formada pela interligação entre esses elementos processadores (HAYKIN, 2001). O modelo geral de um neurônio artificial está apresentado na Figura 7 a seguir:

Figura 7 - Neurônio artificial



Fonte: MORAIS JR (2015)

Em geral, identifica-se três elementos básicos: um conjunto de sinapses, cada qual caracterizado por peso próprio; um somador para somar os sinais de entrada balanceados pelos pesos sinápticos; e uma função de ativação que permite limitar a amplitude do sinal de saída (HAYKIN, 2009).

Neste modelo, as entradas u_1, u_2, \dots, u_n são ponderadas pelos seus pesos sinápticos, que são forças de conexão entre os neurônios. A função Φ combina linearmente todos os sinais de entrada ponderados pelos seus respectivos pesos sinápticos, conforme Equação 29, para produzir um valor de potencial de ativação. A função de ativação η , que produz a saída do neurônio, limita-a a um intervalo de valores razoáveis a serem assumidos. Um valor auxiliar θ , conhecido como bias, é geralmente usado para aumentar ou diminuir a entrada líquida da função de ativação.

$$\Phi = \sum_{i=1}^n u_i w_i \quad (29)$$

2.6.2 Tipos de função de ativação

As funções de ativação podem ser de dois tipos: totalmente diferenciáveis, cujas derivadas de primeira ordem existem em todo o domínio da função; ou parcialmente diferenciáveis, que possuem pontos cujas derivadas são inexistentes. As principais representantes parcialmente diferenciáveis são as indicadas abaixo, e seus gráficos na Figura 8:

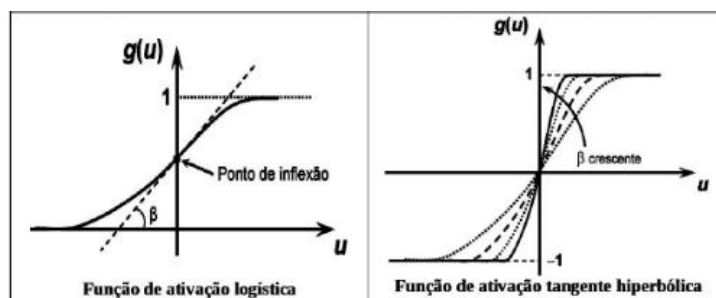
- Função tangente hiperbólica: é comumente utilizada quando é necessário que a saída esteja entre -1 e 1 (Equação 30).

$$f(\Phi) = \frac{1 - e^{-\alpha\Phi}}{1 + e^{-\alpha\Phi}} \quad (30)$$

- Função logística ou *logsig*: conforme Equação 31, sua origem denota a necessidade de limitar o intervalo de variação da derivada da função, pela inclusão de um efeito de saturação (SILVA, 1998).

$$f(\Phi) = \frac{1}{1 + e^{-\beta n}} \quad (31)$$

Figura 8 - Gráficos das principais funções de ativação



Fonte: SILVA et al. (2010).

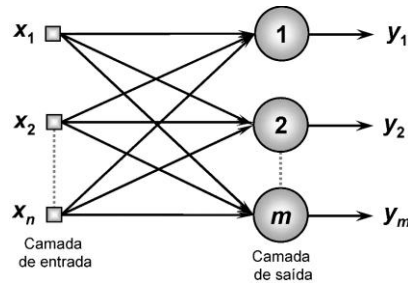
2.6.3 Arquitetura da rede neural

A maneira pela qual os neurônios de uma rede estão dispostos é chamada de arquitetura de rede (HAYKIN, 2001). Para sua definição, são necessários parâmetros como número de camadas da rede, número de nós em cada camada, tipo de conexão entre os nós e topologia da rede. Vale salientar que a estrutura de uma RNA é composta pela camada de entrada, onde há a recepção dos dados, medições ou padrões apresentados à rede; por camadas ocultas, responsáveis pelo processamento dos dados e extração das características do processo; e a camada de saída, que apresenta o resultado final da rede.

Três tipos de arquiteturas são comumente usadas:

- Redes alimentadas adiante (*feedforward*) de uma única camada: não há camadas adicionais entre a camada de entrada e a camada de saída (Figura 9). A camada de entrada não é considerada na contagem de camadas, já que seu papel é de distribuir as entradas das redes às próximas camadas (MORAIS JR, 2015). A propagação de sinais é feita de forma unidirecional: o pulso segue da entrada em direção à única camada da rede, onde é processado e apresentado o resultado final. Este modelo é geralmente empregado em problemas de classificação de padrões e filtragem.

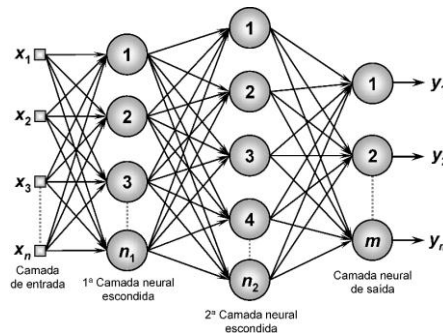
Figura 9 - Representação de rede de uma única camada



Fonte: SILVA et al. (2010).

- Redes alimentadas adiante (*feedforward*) de múltiplas camadas: consideradas as mais utilizadas nas soluções de problemas de engenharia (Figura 10), destacam-se na resolução de algumas classes de problemas, como: reconhecimento de padrões, aproximação de funções, sistemas dinâmicos, identificação e controle de processos e otimização de sistemas (SILVA, 2010). Nessa configuração, a saída de cada neurônio de uma camada precedente é entrada para todos os neurônios da camada seguinte. A adição de uma ou mais camadas ocultas torna a rede capaz de extrair estatísticas de ordem elevada (HAYKIN, 2001).

Figura 10 - Representação de uma rede de múltiplas camadas

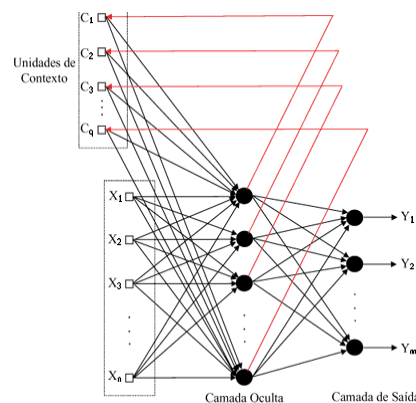


Fonte: SILVA (2010).

O sinal é recebido pela camada de entrada e enviado aos neurônios da primeira camada neural escondida, que por sua vez envia os sinais como entrada para a segunda camada, e assim sucessivamente, num pulso unidirecional até chegar à camada de saída. As camadas intermediárias extraem a maioria das informações e as processam através dos pesos sinápticos e do bias de seus neurônios, representando assim de maneira adequada o ambiente do sistema em questão. Os neurônios da camada de saída recebem os estímulos advindos da última camada escondida e disponibiliza um padrão de resposta como saída da rede.

- Redes recorrentes: são redes neurais com dinâmica de realimentação global, ou seja, apresentam “ciclos” nas suas conexões, isto é, a saída de neurônios de uma camada i são entradas de neurônios de uma camada j , com $j \geq 0$. Há laços de realimentação entre os sinais de saída da rede para com os da camada entrada ou quaisquer outras camadas escondidas ao longo da arquitetura, conforme mostrado na Figura 11. O uso da estrutura recorrente é uma forma de incluir aspectos temporais na operação da rede neural, o que adiciona características dinâmicas, ou seja, torna a rede mais sensível a sinais que variam no tempo. Uma rede recorrente precisa possuir memória temporal (ELMAN, 1990).

Figura 11 - Rede neural recorrente de Elman



Fonte: SEGATTO & COURRY (2006).

2.6.4 Aprendizagem e treinamento de uma RNA

A capacidade de aprender associada à uma rede neural é uma das características mais marcantes e que a torna semelhante ao sistema nervoso dos seres vivos. Trata-se da habilidade de adaptação à regras já existentes ou ao ambiente, tornando seu desempenho variável ao longo do tempo.

O processo de aprendizagem consiste na seguinte sucessão de etapas (HAYKIN, 2001): estímulo do ambiente, consequentes modificações nos parâmetros livres da rede e nova resposta ao ambiente com as modificações sofridas na sua estrutura interna.

O aprendizado ocorre através do treinamento da rede, um processo iterativo de modificação e ajuste dos pesos sinápticos através de um conjunto de regras bem definidas. Vale salientar que a regra de aprendizagem tem influência direta na convergência dos algoritmos. Há

dois tipos de métodos para treinamento de RNA's: o treinamento supervisionado e o não supervisionado.

No treinamento supervisionado, o conhecimento é representado por um conjunto de exemplos de entrada-saída. É como uma situação de professor-aluno: o professor pode mostrar à rede uma resposta desejada para um vetor de treinamento. Tal fase antecede a execução da rede neural, e, no processo de aprendizagem, cada vez que o conjunto de dados de treinamento é apresentado a rede neural, ocorre a chamada época. O processo é repetido época atrás de época, e os parâmetros são ajustados de acordo com o treinamento e com o sinal do erro, que é a diferença entre a resposta esperada e a resposta real da rede. Quando o erro é mínimo, pode-se encerrar o treinamento.

Já no não-supervisionado, não há exemplos da função para serem ensinados para a rede, nem há um professor para supervisionar o processo de aprendizado; os parâmetros são otimizados em relação à uma medida independente da tarefa.

2.6.5 Algoritmos de treinamento

2.6.5.1 Algoritmo backpropagation

É o algoritmo de aprendizagem mais usado quando se trata de redes *multilayer perceptron* (MLP). Largamente utilizado em problemas de identificação, reconhecimento de fala e imagem e previsão de séries temporais (HAYKIN, 2001), é fundamentado num processo de aprendizagem supervisionada, que oferece à rede um conjunto de dados de entrada-saída desejada, que corrige os erros durante o treinamento e ajusta os pesos da rede (PÁDUA, 2000).

O treinamento ocorre em duas fases: a fase *foward*, em que o pulso percorre a rede no sentido “para a frente”, e a fase *backward*, em que o pulso volta. O peso é ajustado utilizando-se os erros entre as saídas da camada de saída e as saídas das camadas ocultas.

O processo de treinamento de redes multicamadas utilizando o algoritmo *backpropagation*, ou regra Delta generalizada, é constituído de duas fases: uma é a propagação adiante, mais conhecida como fase *foward*, em que os sinais de entrada são propagados mediante camada a camada da rede, levando em conta apenas os valores atuais dos pesos sinápticos e do bias, até a obtenção da saída da rede. Tal saída, então, é comparada com a saída desejada e é produzido um erro. A outra fase é a de retropropagação, ou *backward*, em que o pulso volta, corrigindo os pesos e o bias de acordo com a informação do erro entre as saídas.

2.6.5.2 Algoritmo de Levenberg-Maquardt

Apesar de muito utilizado, o algoritmo *backpropagation* tem demonstrado convergência muito lenta em diversas aplicações, especialmente quando se tem grande quantidade de padrões ou quando o erro médio quadrático é grande, não convergindo para um mínimo global e sim para um mínimo local. Tem-se, como alternativa, outros algoritmos de treinamento, a exemplo do de Levenberg-Maquardt, com velocidades de convergência maiores e convergência a um mínimo absoluto.

O algoritmo de treinamento de Levenberg-Maquardt é um método iterativo que consiste em um aperfeiçoamento do método de Gauss-Newton: adiciona-se uma matriz positiva e definida para tornar a hessiana positiva para que o método sempre aponte um mínimo global. Dado um ponto inicial x_0 , é produzida uma série de vetores x_1, x_2, \dots, x_n até convergir para um mínimo local x^* , para o qual a função deverá ser ajustada. Tal algoritmo necessita armazenar uma matriz quadrada com dimensão na ordem do número de conexões, logo, é importante usar uma rede com menos de uma centena de conexões.

2.7 CONTROLE INFERENCIAL

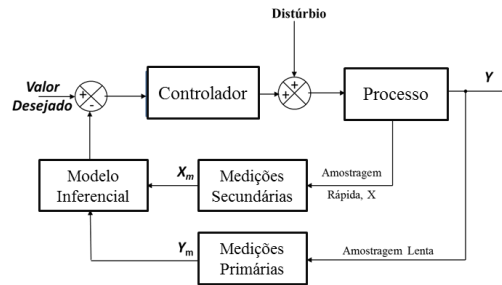
Para que a composição do etilbenzeno na saída do processo seja mantida em valores desejáveis, além de garantir economia e segurança ao sistema, faz-se necessário o controle do processo, auxiliado pelo monitoramento de variáveis críticas.

A estratégia de controle mais usual é o controle realimentação ou *feedback*: o valor da variável de saída é medido por um sensor, transferido pelo transmissor ao controlador, que, por sua vez, decide o que fazer para manter a variável no valor desejado. A partir da decisão do controlador, o sistema deve efetuar uma ação sobre a variável manipulada. Assim, o objetivo de um sistema de controle automático é ajustar a variável manipulada para manter a variável controlada em um valor fixo (*setpoint*), independente de distúrbios (SMITH e CORRIPIO, 2008).

Porém, frequentemente, a saída controlada de um processo não pode ser medida. Consequentemente, não é possível utilizar qualquer configuração de controle *feedback* que necessite da medição direta da variável controlada (SEBORG et al., 2011). Assim, o controle inferencial pode ser utilizado, sendo normalmente inferida a variável controlada, a composição, utilizando-se de dados de variáveis secundárias como a temperatura.

Após a inferência, então, é possível aplicar o algoritmo de controle inferencial *feedback*. A Figura 12 mostra a estrutura geral de controlador inferencial, onde há a substituição do elemento de medição da variável de processo pelo modelo inferencial.

Figura 12 - Diagrama de blocos de um *softsensor* utilizado para controle inferencial.

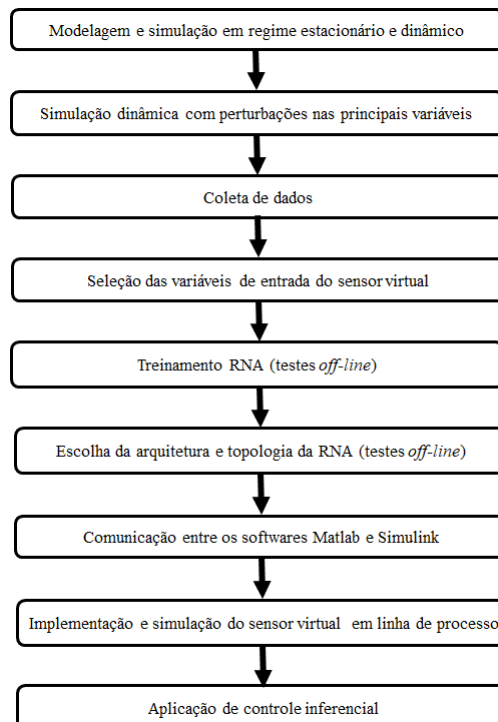


Fonte: MORAIS JR (2015)

3. METODOLOGIA

O fluxograma da Figura 13 apresenta as etapas realizadas neste trabalho. Vale salientar que para a realização da modelagem, simulação e análise de desempenho das diversas estratégias de controle, utilizou-se o software Aspen Dynamics™ com comunicação com o software Matlab/Simulink®.:

Figura 13 - Metodologia empregada no desenvolvimento do trabalho para construção dos sensores virtuais e controle do processo



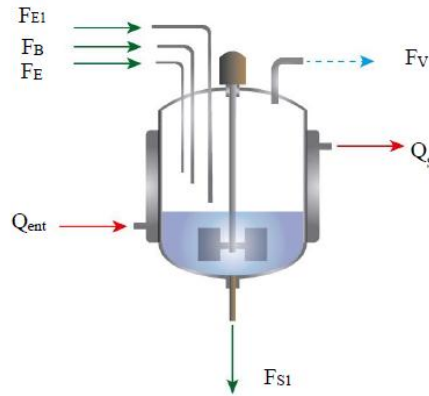
Fonte: Própria autora (2018).

A seguir estão apresentadas as metodologias detalhadas de etapas do trabalho.

3.1 MODELAGEM DOS REATORES

A planta de produção de etilbenzeno possui dois reatores, um adiabático e outro não-adiabático. Para que a simulação do processo seja eficiente, é fundamental dispor de um modelo matemático suficientemente representativo dos reatores. Assim, as equações do balanço de massa por componente (etileno - E, benzeno – B, etilbenzeno – EB e dietilbenzeno – DEB) para o reator adiabático (Figura 14) estão apresentadas nas Equações 32 a 35 a seguir:

Figura 14 - Esquema das correntes do primeiro reator da planta de etilbenzeno



Fonte: MARIZ (2017).

$$\frac{dn_{E,1}}{dt} = F_E + F_{E1}x_{E1} - F_Sx_{ES} + r_EV_1 \quad (32)$$

$$\frac{dn_{B,1}}{dt} = F_B + F_{B1}x_{B1} - F_Sx_{BS} + r_BV_1 \quad (33)$$

$$\frac{dn_{EB,1}}{dt} = F_{EB} + F_{EB1}x_{EB1} - F_Sx_{EB,S} + r_{EB}V_1 \quad (34)$$

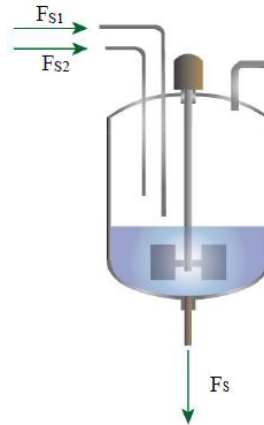
$$\frac{dn_{DEB,1}}{dt} = -F_1x_{DEB1} + r_{DEB}V_1 \quad (35)$$

E o balanço de energia retrata como a temperatura varia no primeiro reator, Equação 36:

$$\rho V_1 C_V \frac{dT_1}{dt} = Q + F_1H_1 + F_BH_B + F_EH_E - F_SH_S + \sum_{i=1}^n r_i(-\Delta H_i) \quad (36)$$

Analogamente, para o segundo reator (não-adiabático), temos o esquema da Figura 15:

Figura 15 – Esquema das correntes do segundo reator da planta de etilbenzeno



Fonte: MARIZ (2017).

Temos as Equações X a XX, referentes ao balanço de massa global e por componente (benzeno, etilbenzeno e dietilbenzeno), nesta ordem:

$$\frac{dn_{E,2}}{dt} = F_{E2}x_{E2} - F_{S2}x_{ES2} + r_E V_2 \quad (37)$$

$$\frac{dn_{B,2}}{dt} = F_{E2}x_{B2} - F_{B2}x_{B2} + r_B V_2 \quad (38)$$

$$\frac{dn_{EB,2}}{dt} = F_{EBS2}x_{EBS2} + F_{E21}x_{EB2} - F_S x_{EB,S} + r_{EB} V_2 \quad (39)$$

$$\frac{dn_{DEB,2}}{dt} = F_{S2}x_{EBS2} + F_{RC2}x_{EB2} - F_{S2}x_{DEB,S} + r_{DEB} V_2 \quad (40)$$

3.2 SELEÇÃO DE VARIÁVEIS

Na metodologia de todas as regressões possíveis, foram avaliados todos os submodelos compostos pelos possíveis subconjuntos das p variáveis e identificados os melhores desses subconjuntos através dos critérios de avaliação, citados na seção 2.5.3, e como mostrado no fluxograma da Figura 16. Vale salientar que todos os subconjuntos disponíveis para o modelo foi inserido um termo constante β_o .

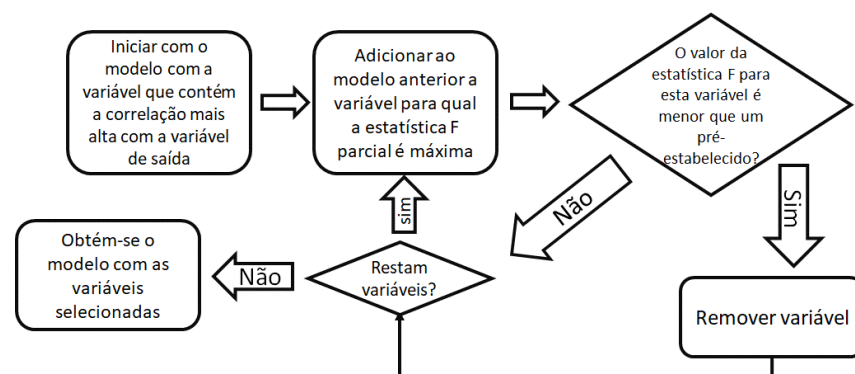
Figura 16 - Etapas do algoritmo TRP.



Fonte: própria autora (2018).

Já na regressão por etapas, iniciou-se com o modelo que contém uma variável, a que possuía a correlação mais alta com a variável de saída Y. Na próxima etapa, foram analisados os regressores candidatos restantes, e a variável para qual a estatística parcial F é máxima foi adicionada ao modelo, se o valor de F calculado fosse maior que um valor f_{entra} estabelecido previamente. Nesta etapa, analisou-se também se havia necessidade de remoção da variável adicionada na etapa anterior calculando-se a estatística F: caso o resultado de F fosse menor que um valor pré-estabelecido f_{sai} , a variável adicionada anteriormente era removida e o modelo prosseguia para a próxima etapa utilizando a mesma dinâmica. O procedimento foi realizado para cada regressor adicionado, e a parada aconteceu quando nenhum regressor pode ser mais adicionado ou removido, conforme Figura 17:

Figura 17 - Etapas do algoritmo de regressão por etapas



Fonte: própria autora (2018).

Em cada etapa do processo, o programa ajustou efetivamente um modelo de regressão múltipla às variáveis no modelo para obtenção da estatística f_{sai} , e um modelo de regressão separado para cada uma das variáveis que não estão no modelo foi ajustado para obter sua estatística f_{entra} .

3.3 TREINAMENTO DA REDE NEURAL

A estratégia utilizada foi a do treinamento supervisionado, que consiste em ter disponível a saída desejada para cada amostra de entrada (SILVA, 2010). Assim, disponibilizou-se em uma tabela de dados todas as entradas e saídas dos processos (vazões, temperaturas, pressões, composições, cargas térmicas) para que a rede neural formulasse as hipóteses a serem aprendidas.

O treinamento consiste do ajuste dos pesos (w_i) e do bias (θ) da rede. Se a saída está de acordo com a saída desejada, os pesos sinápticos e limiares são incrementados na proporção dos valores dos sinais de entrada. Foram utilizadas as seguintes regras de ajuste das Equações 41 e 42 para os pesos e bias (SILVA, 2010):

$$w_i^{atual} = w_i^{anterior} + n (d^{(n)} - y) \cdot x^k \quad (41)$$

$$\theta_i^{atual} = \theta_i^{anterior} + n (d^{(n)} - y) \cdot x^k \quad (42)$$

Representando ambas as equações em uma única vetorial, Equação 43:

$$w^{atual} = w^{anterior} + n (d^{(n)} - y) \cdot x^k \quad (43)$$

Onde: $w = [\theta \ w_1 \ w_2 \ \dots \ w_n]^T$ é o vetor com o bias e os pesos;

$x^{(k)} = [-1 \ x_1^{(k)} \ x_2^{(k)} \ \dots \ x_n^{(k)}]^T$ é a k-ésima amostra de treinamento;

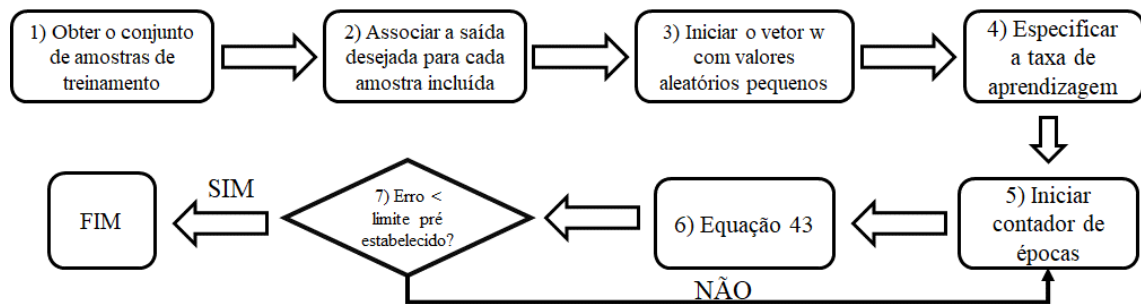
$d^{(k)}$ é o valor desejado para a k-ésima amostra de treinamento;

y é o valor da saída produzida pela rede;

n é a taxa de aprendizagem.

Seguiu-se as etapas do algoritmo da Figura 18:

Figura 18 - Algoritmo de treinamento da rede neural artificial

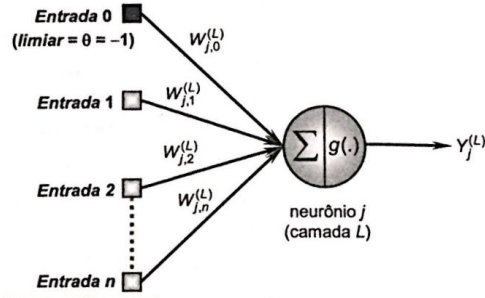


Fonte: Própria autora (2018).

3.3.1 Algoritmo *backpropagation*

Conforme mostrado na seção 2.6.4, o treinamento consiste de um processo de ajuste de pesos da rede e o seu desempenho depende do sucesso destas etapas. Assim, tal ajuste foi realizado para as camadas de saída e as camadas escondidas, seguindo as mesmas etapas iniciais apresentadas no algoritmo da seção anterior. As modificações, apresentadas por Silva (2010), para a rede multicamadas, segundo esquema da Figura 19, foram inseridas posteriormente.

Figura 19 – Estrutura de um neurônio multicamadas



Fonte: Silva (2010).

Com as terminologias e considerações:

$W_{ji}^{(L)}$ são matrizes de pesos cujos elementos são os valores de cada peso sináptico que conecta o j -ésimo neurônio da camada (L) ao i -ésimo neurônio da camada anterior, (L-1);

$I_j^{(L)}$ são vetores cujos elementos são cada entrada ponderada em relação ao j -ésimo neurônio da camada L, como na Equação 44:

$$I_j^{(L)} = \sum_{i=0}^n w_{ji}^{(L)} \cdot x_i \quad (44)$$

$Y_j^{(L)}$ são vetores cujos elementos são a saída de cada j -ésimo neurônio em relação à camada L, Equação 45:

$$Y_j^{(L)} = g(I_j^{(L)}) \quad (45)$$

Utilizando a definição de gradiente e a regra da cadeia para a diferenciação, e considerando $L=3$ a camada de saída, obteve-se o erro na saída, mostrado pela Equação 46:

$$\nabla E^{(3)} = \frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(3)}} = \frac{\partial E}{\partial Y_j^{(3)}} \frac{\partial Y_j^{(3)}}{\partial I_j^{(3)}} \frac{\partial I_j^{(3)}}{\partial W_{ji}^{(3)}} \quad (46)$$

Utilizando-se as definições anteriores, o erro fica (Equação 47):

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(3)}} = -(d_j - Y_j^{(3)}) g'(I_j^{(3)}) Y_i^{(2)} \quad (47)$$

Assim, o passo *forward* consistiu essencialmente em obter estes três parâmetros para todas as camadas. Já para o passo *backward*, necessitou-se obter os parâmetros descritos nas 5 subetapas abaixo:

- 1) Definiu-se, pela Equação 48, o gradiente local em relação ao j-ésimo neurônio da camada de saída (L=3):

$$\delta_j^{(3)} = (d_j - Y_j^{(3)})g'(I_j^{(3)}) \quad (48)$$

- 2) Realizou-se o ajuste da matriz de pesos, segundo Equação 49, feito em direção oposta ao gradiente para minimizar o erro para a camada de saída:

$$\Delta W_{ij}^{(3)} = -\eta \delta_j^{(3)} Y_i^{(2)} \quad (49)$$

E considerando que o procedimento é iterativo, a expressão pode ser convertida na Equação 50:

$$W_{ij}^{(3)}(t+1) = W_{ij}^{(3)}(t) + \eta \delta_j^{(3)} Y_i^{(2)} \quad (50)$$

- 3) Após o ajuste da camada de saída, prosseguiu-se, então, com o ajuste dos pesos sinápticos das camadas intermediárias, para que o erro entre a saída da rede neural em relação ao erro produzido pelo processo de retropropagação fosse minimizado, de modo análogo ao passo anterior, como mostrado na Equação 52:

$$\delta_j^{(2)} = (d_j - Y_j^{(2)})g'(I_j^{(2)}) \quad (51)$$

$$W_{ij}^{(2)}(t+1) = W_{ij}^{(2)}(t) + \eta \delta_j^{(2)} Y_i^{(1)} \quad (52)$$

E para a primeira camada:

$$\delta_j^{(1)} = (d_j - Y_j^{(1)})g'(I_j^{(1)}) \quad (53)$$

$$W_{ij}^{(1)}(t+1) = W_{ij}^{(1)}(t) + \eta \delta_j^{(1)} \quad (54)$$

Feitos estes passos, foi obtido novamente o $Y_j^{(3)}$, agora ajustado, segundo a Equação 45, apresentada anteriormente. Foi calculado, em seguida, o erro quadrático médio, conforme apresentado na seção 3.2.4.1 e seguidas as etapas 7 e 8 do algoritmo da Figura 19.

3.3.2 Modificações de Levenberg-Maquardt

O algoritmo *backpropagation* possui convergência lenta e exige alto esforço computacional. Para contornar esse problema, várias técnicas envolvendo otimização têm sido

utilizadas, a exemplo do algoritmo de Levenberg-Maquardt (LEVENBERG, 1944). É uma aproximação do método de Newton, um método baseado no método de mínimos quadrados, de gradiente de segunda ordem, utilizado para modelos não-lineares (SILVA, 2010).

O erro em relação à k-ésima amostra de treinamento foi definido pela Equação 55:

$$E(k) = d(k) - Y^{(3)}(k) \quad (55)$$

E para uma amostra específica:

$$V = \frac{1}{2} E^{(T)}(k)E(k) \quad (56)$$

Seguindo o princípio do método de Newton, a função necessita ser minimizada. Assim, a minimização de uma função $V(z)$ em relação a um vetor paramétrico z é dada pela Equação 57 abaixo, iterativa:

$$\Delta z = -(\nabla^2 V(z))^{-1} \nabla V(z) \quad (57)$$

Onde $\nabla^2 V(z)$ é a matriz de derivadas de segunda ordem, chamada Hessiana, $\nabla V(z)$ é a matriz de derivadas de primeira ordem da função $V(z)$, chamada Jacobiana. A função $V(z)$, denotada pela Equação 58, é definida como a soma de m funções quadráticas, para um vetor paramétrico z :

$$V(z) = \sum_{i=1}^m e_i^2(z) \quad (58)$$

Assim, temos (Equação 59):

$$\nabla V(z) = J^T(z) \cdot e(z) \quad (59)$$

Arranjando a equação anterior para a Equação 60:

$$\nabla^2 V(z) = J^T(z) \cdot J(z) + \mu \cdot I \quad (60)$$

Inserindo na equação inicial, concluiu-se com a Equação 61:

$$\nabla^2 V(z) = (J^T(z) \cdot J(z) + \mu \cdot I)^{-1} \cdot J^T(z) \cdot e(z) \quad (61)$$

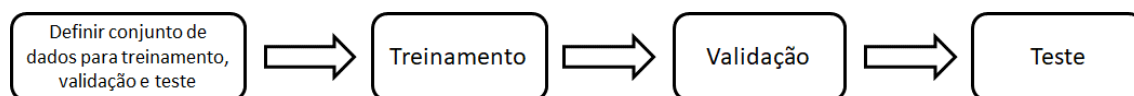
3.3.3 Critério de Parada Empregado

Para que o treinamento termine, é necessário o uso de um critério de parada robusto, para que o erro entre o valor estimado pela rede e o valor experimental não aumente com o passar das épocas do treinamento. O critério de parada utilizado neste trabalho foi o da validação cruzada, uma técnica que avalia a capacidade de generalização do modelo a partir de um conjunto de dados (HOHAVI, 1995).

A validação cruzada parte do princípio de treinar as redes por diferentes conjuntos de treinamento. A metodologia consiste em escolher um número $k \leq p$, reservando parte de todo o conjunto de dados para treinar a rede. Para cada rede no conjunto, reserva-se k exemplos para teste, onde os conjuntos de teste n devem ter sobreposição mínima, ou seja, os conjuntos de treinamento n devem ser tão diferentes quanto for possível, definindo assim quantos modelos temporários serão criados. Se, por exemplo, $k \geq p/n$, é possível escolher os conjuntos de teste k sem sobreposição, o que nos permite estimar o erro de generalização. É preciso reservar também um grupo de dados para os testes dos modelos de treinamento, com uma boa escolha do tamanho do conjunto (n) e do tamanho do conjunto de teste (k), a ambiguidade aumentará mais e, assim, será possível diminuir em geral o erro de generalização.

Assim, o algoritmo seguiu os seguintes passos: definição dos conjuntos, separando 70% dos dados para a aprendizagem do algoritmo, 15% para a verificação da capacidade de generalização e 15% avaliação do desempenho, como mostra a Figura 20 abaixo:

Figura 20. Etapas do algoritmo de treinamento



Fonte: Própria autora (2018).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Aqui são apresentados os principais resultados obtidos para as metodologias desenvolvidas na seção anterior. Inicia-se com os resultados da simulação, dos quais dependem todo o trabalho. Depois, são trazidos os resultados da seleção de variáveis, que serão utilizados para definir as entradas do sensor virtual que, por sua vez, estimará a concentração usada para o controle da composição do EB, garantindo a qualidade e pureza do produto final.

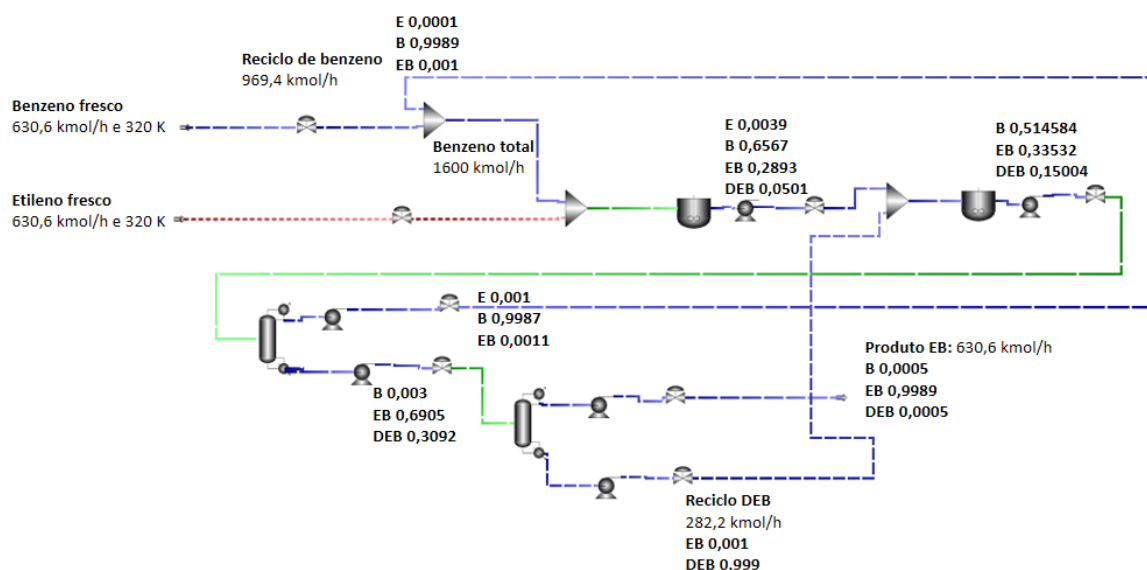
Com o objetivo de tornar mais clara a apresentação dos resultados, os mesmos foram divididos em três partes: a primeira diz respeito à análise dos efeitos das variáveis de entrada sobre a concentração de saída, a segunda, com relação à construção do sensor virtual, e a terceira remete às estratégias de controle e a comparação entre elas.

4.1 MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO PRODUTIVO DO ETILBENZENO

A Figura 21 mostra o fluxograma do processo do etilbenzeno com a dimensão dos equipamentos e os valores das correntes de alimentação e saída. Ambos os reatores operam a alta pressão e temperaturas para manter a taxa de reação nos níveis requeridos.

O primeiro reator, com volume operacional de 200 m³, recebe uma corrente de alimentação de 630,6 kmol/h de benzeno puro e outra corrente de etileno puro de mesma vazão molar. Ele opera a 434 K e 20 atm, e é resfriado mediante vapor de 414 K em uma serpentina, além de uma camisa de resfriamento com área de troca térmica de 151 m², totalizando 602 m² de área de transferência de calor, necessária para remover $2,46 \times 10^6$ cal/s. A corrente de saída tem como produtos o benzeno, etilbenzeno, com cerca de 464 kmol/h, e dietilbenzeno, que serão alimentados no segundo reator.

Figura 21. Fluxograma do processo produtivo do EB implementado no simulador



Fonte: Própria autora (2018).

O efluente do primeiro reator alimenta o segundo numa vazão de 1696 kmol/h, onde praticamente todo o DEB gerado no primeiro reator é convertido em EB a partir da reação com o benzeno presente. Além disso, a corrente rica em DEB (282,2 kmol/h) que sai da base da segunda coluna de destilação alimenta o segundo reator, adiabático, através de uma corrente de reciclo, que opera a 432 K e 19 atm. O efluente deste, composto de praticamente benzeno e etilbenzeno, com traços de dietilbenzeno, sai a altas pressões e temperaturas, a uma vazão de 1882 kmol/h.

Os dois processos de separação são necessários para remover benzeno do EB e EB do DEB. O modelo utilizado para o cálculo das propriedades termodinâmicas foi o de Chao-Seader, implementado no simulador comercial *Aspen Plus e Dynamics*TM. A saída do segundo reator é alimentação da primeira coluna de destilação, que possui 21 estágios, com razão de refluxo de 0,774, com carga térmica do refeedor de 8,13 MW, devido à alta temperatura da alimentação, e operando a vácuo moderado de 0,3 atm. Possui temperatura na base de 390 K, o que permite o uso de um vapor de baixa pressão (433 K, 4 atm) no refeedor. Vale salientar que os pontos de bolha para B, EB e DEB são 353, 409 e 457 K, respectivamente; as diferenças significativas justificam o uso de poucos pratos nas duas colunas e a baixa taxa de refluxo.

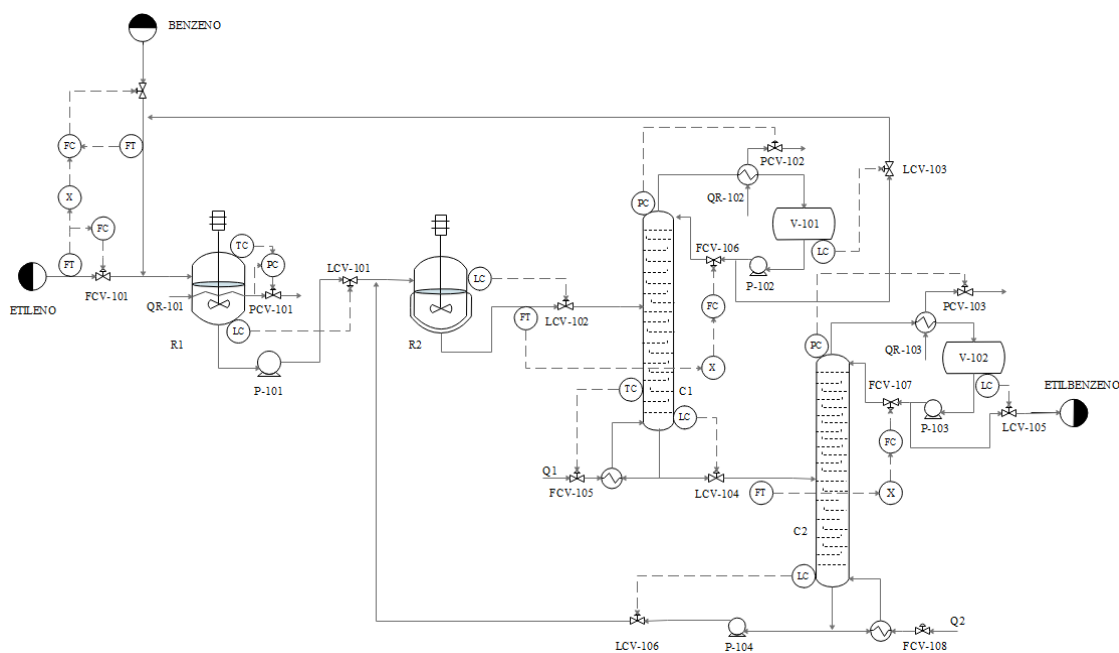
Já a segunda coluna de destilação possui 25 estágios e uma taxa de refluxo de 0,661. Ela opera à pressão de 0,1 atm, com temperatura de base de 407 K, produzindo um destilado de alta

pureza em EB (99,9% mol) e tem sua corrente de base reciclada para o segundo reator. Esse sistema permite o uso de água fria no condensador e um vapor de baixa pressão no refeedor.

4.1.1 Simulação em regime estacionário

Os dados de entrada do sensor virtual são preferencialmente oriundos de resultados da simulação, visto que dados de sensores físicos instalados na planta podem não ser confiáveis devido a problemas de medição, como descalibração e interferências. (FORTUNA et al., 2007). Além disso, a simulação em regime estacionário dá ao engenheiro o conhecimento das condições iniciais necessárias para a operação em regime dinâmico e exige dele o conhecimento do comportamento do processo em regime estacionário para um bom entendimento da dinâmica das composições em uma coluna de destilação (MORAIS JR, 2015).

Figura 22 - Simulação do processo produtivo do etilbenzeno

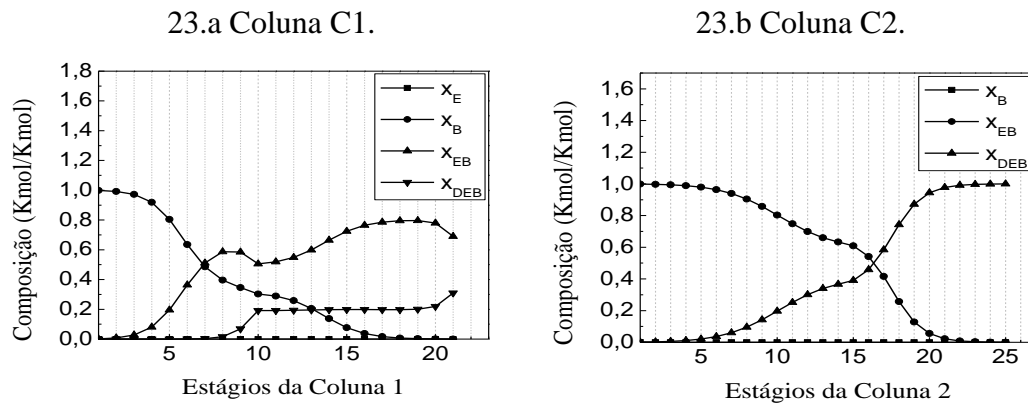


Fonte: Própria autora (2018).

Assim, o processo produtivo do EB, mostrado no fluxograma da Figura 22, foi simulado em regime estacionário no *software Aspen Plus™*, com os dados de projeto e condições iniciais obtidos em Luyben (2011). Foram fixados os dois graus de liberdade necessários para o processo de destilação, sendo as seguintes variáveis: vazão de base e razão de refluxo. Essas variáveis foram manipuladas de modo a se ajustar aos dados de planta. O modelo termodinâmico empregado para os cálculos das propriedades físicas foi de *Chao-Seader*. Todos os resultados foram compatíveis com os apresentados na literatura.

Os gráficos das Figuras 23.a e 23.b apresentam os perfis de composição ao longo dos estágios de C1 e C2. Verifica-se, de acordo com a figura 23.a, que em C1 o benzeno, x_B , sai em alta pureza no estágio 1 (topo). O etileno é apontado como x_E . De acordo com a figura 23.b, o etilbenzeno e o dietilbenzeno, x_{EB} e x_{DEB} , estão em alta pureza nos estágios 1 e 25 (topo e base) de C2, respectivamente.

Figura 23 - Perfis de composição molar nas colunas de destilação C1 e C2.



É importante observar o grau de pureza do etilbenzeno no estágio 25, topo da segunda torre de destilação, com aproximadamente 99,9 % de pureza, o que caracteriza tal processo como destilação de alta pureza. Além disso, o comportamento do EB é caracterizado por uma curva monótona de concentração, apresentando como região de maior concentração o topo da coluna.

4.1.2 Resultados em regime transiente

Após realizar e avaliar a simulação em regime estacionário, os equipamentos foram dimensionados e foi feita a conversão para o transiente, cuja simulação deu-se no *Aspen DynamicsTM*, onde foram efetuadas perturbações nas seguintes variáveis de C2: carga térmica (Q_2), vazão de entrada (F_2), vazão de topo e de base (B_2) e (D_2), conforme gráficos das Figuras 24 e 25. Durante as simulações, apenas uma das variáveis foi modificada, enquanto as demais permaneceram constantes.

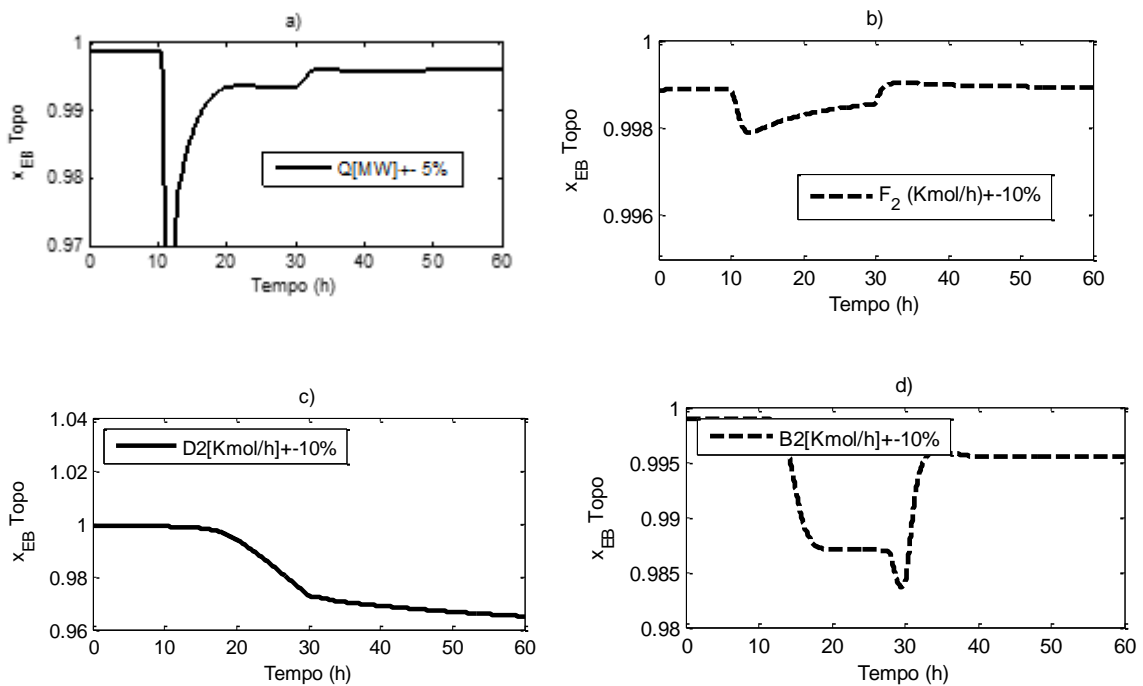
O estudo deve proporcionar uma relação de causa efeito de uma entrada $x_i(k)$ na saída $y_i(k)$, em busca do melhor modelo de inferência (sensor virtual). Como as análises de seleção de variáveis se tornam inviáveis quando feitas com muitas entradas, a realização das

perturbações se mostra imprescindível para verificar quais das variáveis de entrada do processo mais influenciam na composição de saída. Definidas por essa triagem, então, formam um conjunto menor de variáveis em que serão aplicados os métodos de seleção.

Vale ressaltar que as contribuições da modelagem vão além da relação causa efeito e do entendimento do problema. Porém, a seleção das variáveis de entrada a serem efetivamente utilizadas pelo sensor virtual, em geral, não pode ser feita apenas baseada somente nesses aspectos teóricos, sendo necessário o estudo de um modelo com métodos de seleção de variáveis que justifiquem a estrutura do modelo de inferência (MORAIS JR, 2015).

Para o procedimento de coleta dos dados necessários à seleção de variáveis de entrada do soft sensor e treinamento off-line da rede neural, foram inseridos distúrbios com amplitude de $\pm 10\%$ em F_2 , D_2 e B_2 ; e sinais pseudo-aleatórios (PRBS) em Q_2 , com uma amplitude de 5%, todos em tempos diferentes.

Figura 24. Respostas da composição de EB no topo para perturbações em C2.

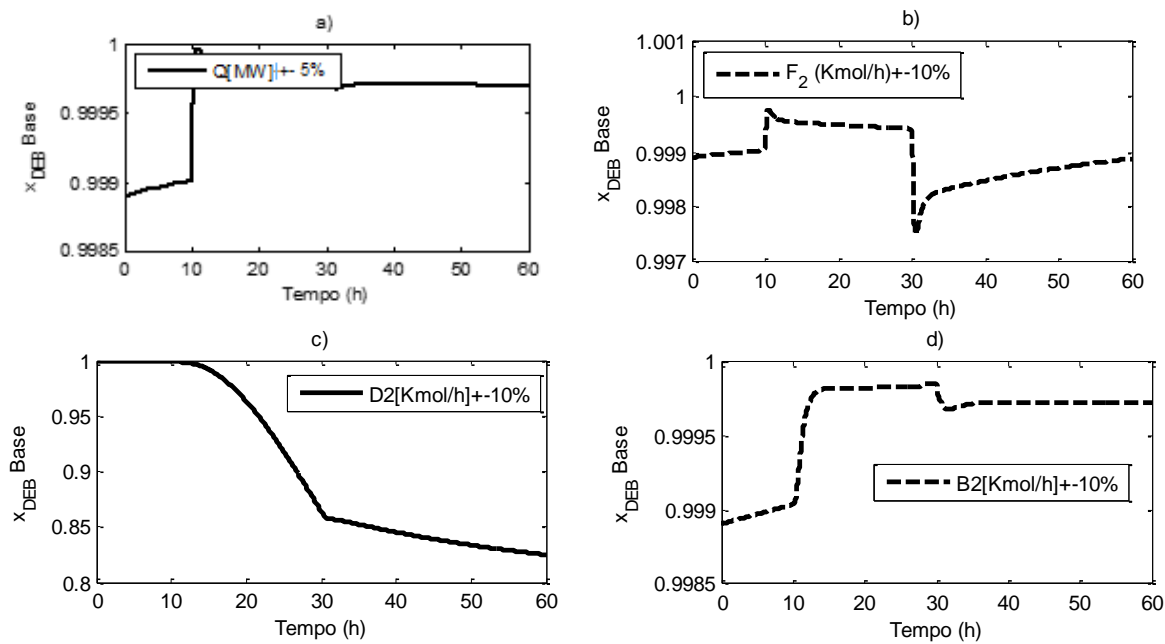


Fonte: Própria autora (2018).

Assim, de acordo com os gráficos da Figura 24, verifica-se que a composição do etilbenzeno (x_{EB}) é sensível a mudanças nas variáveis Q_2 , F_2 , D_2 e B_2 , proporcionando para essa resposta de composição sobre-elevações percentuais consideráveis. Do mesmo modo, verifica-

se que para os mesmos distúrbios efetuados, foram proporcionadas alterações na composição do dietilbenzeno na corrente de base da coluna 2 (x_{DEB}), Figura 25. Os efeitos reversos nas respostas da composição do DEB na base da coluna foram contrários aos observados com relação ao EB.

Figura 25. Respostas da composição de DEB na base da coluna 2 a perturbações.



Fonte: Própria autora (2018)

Após avaliar as respostas aos distúrbios, notou-se que todas as variáveis previamente selecionadas exerciam influência significativa sobre as composições. Formou-se com elas o conjunto de 8 regressores, como mostrado na Tabela 2, para a seleção de variáveis dos modelos de inferência das composições do EB e DEB no topo e na base da segunda coluna, respectivamente.

Tabela 2 - Lista de variáveis candidatas para seleção.

SAÍDAS	ENTRADAS (VARIÁVEIS CANDIDATAS)							
	u1	u2	u3	u4	u5	u6	u7	u8
y_{EB} (topo) e x_{DEB} (base) na coluna 2 (kmol/kmol)	Vazão de topo F_2 (kmol/h)	Carga térmica Q_2 (MW)	Vazão de destilado FD_2 (kmol/h)	Vazão de base FB_2 (kmol/h)	Vazão de refluxo R_2 (kmol/h)	Temperatura estágio 20 T_{20} (K)	Temperatura estágio 21 T_{21} (K)	Temperatura estágio 22 T_{22} (K)

Fonte: própria autora (2018).

4.2 SELEÇÃO DE VARIÁVEIS

Após a utilização das metodologias TRP e Stepwise Regression para seleção de variáveis secundárias em modelos de inferência, foram obtidos os cinco melhores modelos apresentados na Tabela 3. São destacados os dois melhores modelos para as duas variáveis de saída (y_{EB} - topo e x_{DEB} – base), juntamente com os critérios estatísticos de avaliação.

Tabela 3 - Melhores conjuntos de variáveis secundárias.

TRP				Regressão por Etapas	
Modelos y_{EB} -topo	MQE	Cp	R^2_{aju}	MQE	R^2_{aju}
[u₁ u₂ u₃ u₄ u₅ u₆ u₇ u₈]	0,000654	0,9970	0,8906	0,000654	0,8906
[u ₁ u ₂ u ₃ u ₄ u ₅ u ₇ u ₈]	0,000673	0,9967	0,8875	0,000673	0,8875
[u ₁ u ₂ u ₃ u ₄ u ₅ u ₆ u ₈]	0,000678	0,9967	0,8865	0,000678	0,8865
[u ₁ u ₂ u ₃ u ₄ u ₆ u ₇ u ₈]	0,000679	0,9967	0,8864	0,000679	0,8864
[u ₁ u ₂ u ₃ u ₄ u ₅ u ₈]	0,000684	0,9963	0,8851	0,000684	0,8851
Modelos x_{DEB} -base	MQE	Cp	R^2_{aju}	MQE	R^2_{aju}
[u₁ u₂ u₃ u₄ u₅ u₆ u₇ u₈]	0,00359	0,9969	0,9491	0,00359	0,9491
[u ₁ u ₂ u ₃ u ₄ u ₅ u ₇ u ₈]	0,00375	0,9966	0,9469	0,00375	0,9469
[u ₁ u ₂ u ₃ u ₄ u ₅ u ₆ u ₈]	0,00389	0,9966	0,9449	0,00389	0,9449
[u ₁ u ₂ u ₃ u ₄ u ₆ u ₇ u ₈]	0,00404	0,9966	0,9428	0,00404	0,9428
[u ₁ u ₂ u ₃ u ₄ u ₅ u ₆ u ₇]	0,00409	0,9966	0,9420	0,00409	0,9420

Fonte: própria autora (2018).

Os resultados da regressão por etapas confirmaram os da TRP, tendo sido obtidos valores semelhantes para os critérios estatísticos de avaliação. Não foi necessária nenhuma etapa de retirada de variáveis para o método *stepwise*. Vale salientar que, quando comparados os dois métodos, recomenda-se o da TRP, haja vista que ele pode encontrar, de maneira global e entre todas as possibilidades, a melhor equação de regressão de acordo com os critérios apontados. Já a metodologia por etapas pode distorcer o procedimento por considerar as dependências entre os regressores. O modelo que contém as oito variáveis atingiu os melhores critérios: menor MQE e maiores Cp e R^2 ajustado.

Além disso, foram selecionados os mesmos regressores para ambos os modelos de inferência de composição (saídas). Por fim, foram selecionadas as seguintes variáveis: vazões (alimentação, topo, base e refluxo), além da carga térmica e das temperaturas dos estágios 20,

21 e 22, todas referentes à coluna 2. Logo, verificou-se que essas variáveis exercem influência significativa nas composições de saída dos compostos de interesse.

4.3. CONSTRUÇÃO E IMPLEMENTAÇÃO DO SENSOR VIRTUAL

Para que o sensor virtual forneça adequadamente as saídas de composição da coluna de destilação, é preciso a coleta e divisão de dados de entrada e saída e definição de variáveis de entrada. Além disso, é necessário o treinamento da rede neural, com etapas de definição da melhor arquitetura da rede e do melhor número de camadas ocultas para atingir o objetivo definido (MORAIS JR, 2015).

4.3.1. Treinamento *off-line* da RNA

Foram coletados os valores das diversas variáveis durante 60h na etapa de simulação. As variáveis selecionadas na etapa anterior foram definidas como variáveis de entrada da rede neural por exercerem maior influência sobre as composições de saída a serem inferenciadas.

A função de ativação utilizada foi a *logsig*, por ser a mais utilizada para a construção de RNAs, além de apresentar um equilíbrio entre o desempenho linear e o não-linear (SANCHEZ, 2009). Como a função *logsig* possui um intervalo [0 1] de normalização, os sinais de entrada foram normalizados para um melhor desempenho da inferência, já que as entradas possuíam unidades diferentes. Além disso, no processo de aprendizagem da RNA, costuma-se dividir os dados entre as etapas de treinamento, validação e teste. Neste trabalho, foram utilizados 70% do conjunto de dados para o treinamento, 15% para a validação e 15% para o teste.

Foram testados dois tipos de arquiteturas: rede de Elman e *multilayer perceptron* (MLP). Observou-se então, que, além da MLP resultar em menor valor de erro entre a saída real e a estimada pela rede, o tempo de treinamento para ela era significativamente menor – enquanto um treinamento da rede de Elman durava até 30 min, a MLP levava apenas de 2 a 3 min para concluir o treinamento. Tal comportamento é justificável, já que a rede *multilayer perceptron* pode ser treinada para se aproximar virtualmente qualquer função suave e mensurável, como são os balanços de massa e energia. Ao contrário de outras técnicas estatísticas, a MLP não faz pressupostos anteriores sobre a distribuição de dados. Ela pode modelar funções altamente não-lineares e pode ser treinada para generalizar com precisão quando apresentados novos dados de uso (GARDNER and DORLING, 1998), além de aprender modelos em tempo real (*on-line learning*).

Para esta etapa, foi utilizado um computador com AMD Phenom™ II-X4-B95 de 3,0 GHz e com 8GB de memória RAM. O software utilizado foi o Matlab®, através da *Neural Network Toolbox*, que fornece funções e aplicativos para a modelagem de sistemas não-lineares complexos que não são facilmente modelados com uma equação de forma fechada, além de suportar o aprendizado supervisionado.

No tocante à definição do número de neurônios na camada oculta, esse é obtido experimentalmente, através de um processo de tentativa e erro. Apesar disso, é preferível uma rede com poucos neurônios nas camadas ocultas porque apresenta melhor poder de generalização de problemas, ou seja, problemas de sobre ajustes ou excesso de treinamento (*overfitting*) são reduzidos. Entretanto, a utilização de poucos neurônios nas camadas ocultas pode comprometer a habilidade da rede que é suficiente para modelar e aprender os dados de problemas complexos (*underfitting*). Assim, é primordial encontrar um número de neurônios por camada que seja ideal para generalizar dados de entrada sem comprometer o aprendizado (MORAIS JR, 2015; e HAYKIN, 2001).

Assim, foram testados diversas quantidades de neurônios em duas ou três camadas escondidas, conforme Tabela 4, já que a utilização de um grande número de camadas escondidas não é recomendado. Cada vez que o erro médio durante o treinamento é utilizado para atualizar os pesos das sinapses da camada imediatamente anterior, ele se torna menos útil ou impreciso.

Tabela 4 - Topologias das RNA avaliadas para construção dos sensores virtuais

Número de Camadas Ocultas	Nº de Neurônios
1	5, 10,..., 20
2	5, 10,..., 20

Fonte: Própria autora (2018).

Por fim, o algoritmo de treinamento escolhido foi o *Levenberg-Marquardt*, que, dentre os outros algoritmos de treinamento, possui uma convergência mais rápida (WOLF, 2004). Após, enfim, todos os testes para avaliar a escolha da arquitetura, da função de ativação, do algoritmo de treinamento e do número de camadas com seu respectivo número de neurônios,

foram treinadas cerca de 160 RNAs. O melhor resultado, ou seja, o menor erro entre os dados reais e os dados estimados de composição do EB no topo da segunda coluna de destilação foi obtido com a topologia [15 15 15]: 1 camada de entrada e duas camadas escondidas, com 15 neurônios cada, conforme mostrado na Tabela 5 a seguir.

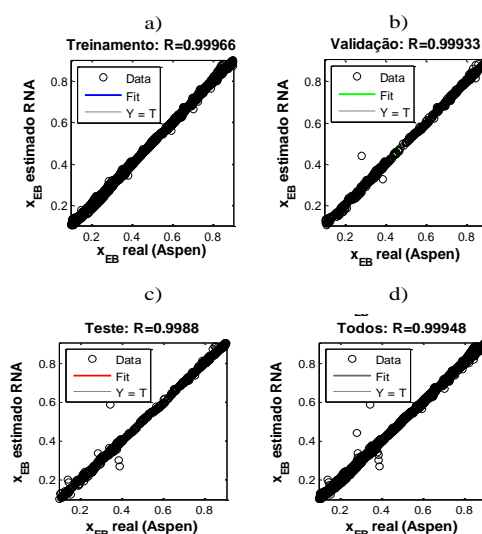
Tabela 5 - Dados da RNA com melhor resultado off-line para inferência de composição

Topologia	[15 15 15]
Algoritmo de treinamento	Levenberg-Maquardt
Arquitetura	Multilayer perceptron
Função de ativação	Logsig
Performance (erro)	$2,27 \times 10^{-6}$
Número de iterações	78

Fonte: Própria autora (2018).

Geralmente, utiliza-se a análise de regressão dos dados para avaliar a relação entre duas ou mais variáveis. Ela é uma técnica que permite visualizar a relação de uma variável dependente com outras variáveis independentes (MONTGOMERY e RUNGE, 2012; HAYKIN, 2001). Assim, o ajuste dos dados nas etapas de treinamento, validação e teste para esta rede neural escolhida é mostrado na Figura 26:

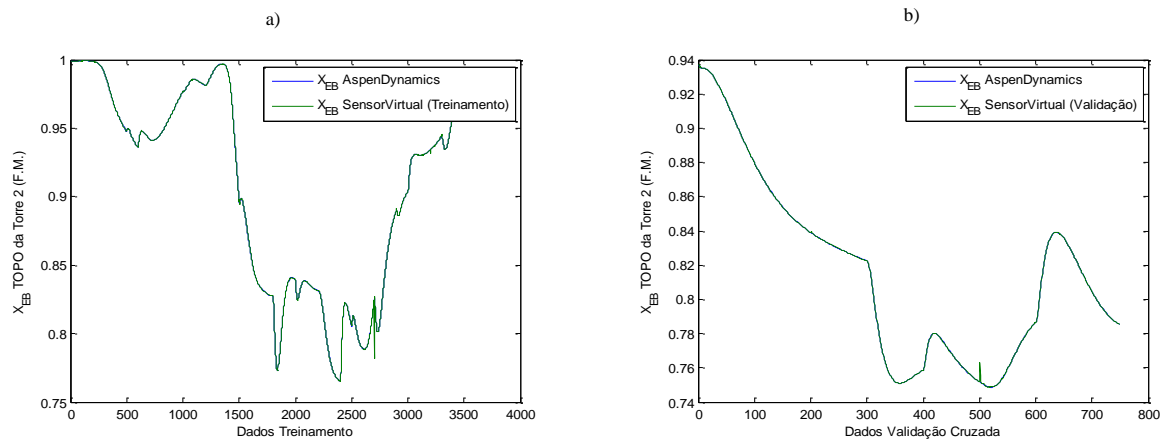
Figura 26 a, b, c, d - Ajuste dos dados em cada etapa da rede neural



Fonte: própria autora, desenvolvido em MATLAB ® (2018)

Como pode ser observado nos gráficos acima, as estimativas geradas pelo modelo da rede neural se ajustam com os dados reais numa inclinação de 45°, o que fornece uma conclusão de ajuste adequado aos dados experimentais. Os gráficos das Figuras 27 a) e b), por sua vez, apresentam, respectivamente, os resultados do conjunto de dados de treinamento e validação do Sensor Virtual Neural do X_{EB} em comparação com dados do simulador Aspen Dynamics™.

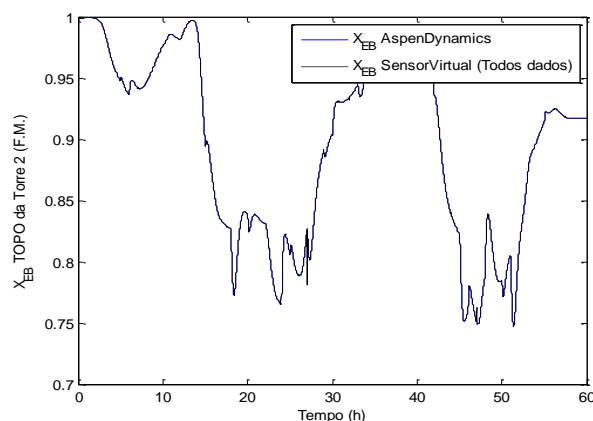
Figura 27. a) Sensor Virtual Neural do X_{CCl_4} e Saída do Simulador (Teste); b) Sensor Virtual Neural do X_{CCl_4} e Saída do Simulador (Validação Cruzada)



Fonte: Própria autora (2018).

Vale salientar que essa etapa foi alimentada com um conjunto de dados distintos dos quais elas foram treinadas (15% dos dados totais), porém sem extrapolação dos limites de treinamento. Assim, verifica-se que os dados de validação cruzada forneceram bons resultados, o que aumenta a capacidade de generalização do sensor virtual neural desenvolvido. Já na Figura 28 são apresentados os resultados da inferência com todos os dados da composição de topo do EB na coluna 2 durante 60h de simulação.

Figura 28 - Sensor Virtual Neural dinâmico do X_{EB} e Saída do Simulador

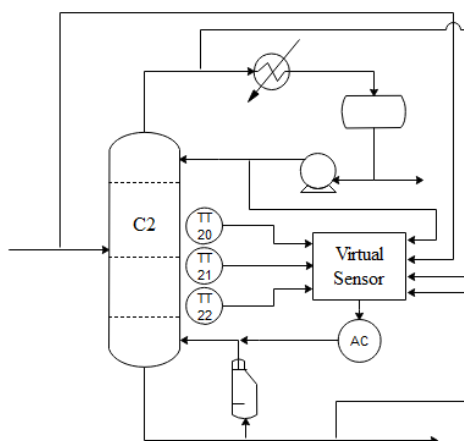


Logo, os sensores virtuais apresentaram bons resultados para inferência da composição de alta pureza do destilado da segunda torre de destilação. É importante observar a ocorrência de diversas perturbações nas variáveis de entrada, conjunto de Dados 1, o que aumenta a robustez dos sensores e garante uma boa confiabilidade de estimativa.

4.4 IMPLEMENTAÇÃO DO CONTROLE INFERENCIAL

Esta etapa consiste em implementar, em linha de processo simulado pelo *Aspen Dynamics*, a melhor RNA eleita para inferência como uma medição de composição do EB no topo da segunda coluna de destilação (C_2). Para tal fim, gerou-se um bloco código de comunicação entre o sensor virtual no *software* Matlab® e a planta, conforme Figura 29.

Figura 29 - Esquema do controle de composição através da medição da rede neural.

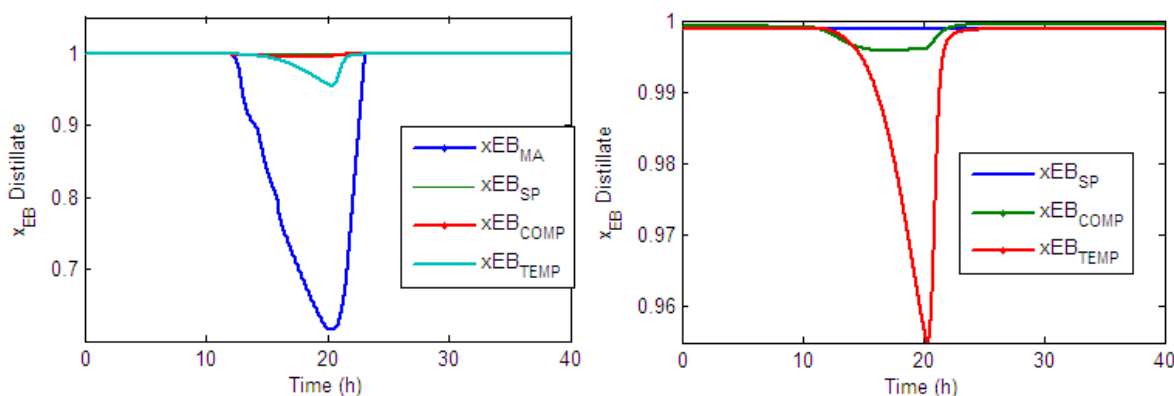


Fonte: Própria autora (2018).

Para avaliar a eficácia dos controle implementados foram efetuadas variações no setpoint da vazão de alimentação, especificamente em um grande distúrbio do processo, que é

a a fração de benzeno na vazão de alimentação em -20% (em 10h) e +20% (em 20h). Logo em seguida avaliou-se o comportamento da composição: em malha aberta, quando não há controle algum sobre o x_{EB} ; quando o controle é feito indiretamente, usando a medição da temperatura do prato (T17) mais sensível da coluna (x_{EB_TEMP}); e usando a informação da medição a partir das estimativas fornecidas pelo sensor virtual neural (x_{EB_COMP}). Os resultados das estratégias de controle são apresentados nos gráficos da Figura 30.

Figura 30 - Controle de composição usando diferentes estratégias.



Fonte: Própria autora (2018).

Como pode ser observado no gráfico da Figura 30, em uma análise qualitativa, a composição na condição de malha aberta (x_{EB_MA}) não foi capaz de reestabelecer a condição de regime estacionário da coluna. Quando comparado o controle de temperatura do estágio 17 da coluna, sendo seu efeito avaliado na composição do etilbenzeno (x_{EB_TEMP}), e a composição via sensor virtual com RNA (x_{EB_COMP}) percebe-se que a controle por x_{EB_COMP} foi mais efetivo, ocorrendo com isso menor tempo de estabilização e uma menor sobre elevação percentual (overshooting). Desse modo, o controle inferencial via sensor virtual desmostrou ser uma alternativa viável para implantação da metodologia no processo industrial de produção do composto etilbenzeno.

5 CONCLUSÕES

O processo de produção de etilbenzeno foi estudado e simulado em regime estacionário e transiente. Os resultados obtidos pela simulação foram consistentes com os obtidos na literatura (LUYBEN, 2011).

Para a etapa de seleção das variáveis de entrada do *soft sensor*, foram utilizadas técnicas de seleção de variáveis, já que o processo é complexo e só o “feeling” de engenharia

não foi suficiente para determinação, previamente definidas algumas variáveis que mais influenciaram a composição de saída do etilbenzeno no topo da segunda coluna de destilação. Foram perturbadas as variáveis carga térmica (Q2), fluxo de entrada (F2) e vazões de base (B2) e (D2). Além destes, a vazão de refluxo (R2) e as três temperaturas dos estágios da coluna identificados como os mais sensíveis foram adicionados ao conjunto inicial de regressores: T20, T21 e T22. Duas metodologias foram utilizadas para a seleção das variáveis: Todas as Regressões Possíveis (TRP) e Regressão por Etapas. Ambos foram eficientes, porém recomenda-se a utilização da TRP, que permite encontrar, de maneira global e entre todas as possibilidades, a melhor equação de regressão de acordo com os critérios estabelecidos. Todas as variáveis mencionadas anteriormente foram definidas como variáveis de entrada.

Na construção do sensor virtual, definiu-se o uso da arquitetura *multilayer perceptron* (MLP), por apresentar convergência mais rápida e menor tempo de treinamento quando comparada à outras arquiteturas como a Rede de Elman. Após testar diversas combinações de camadas e número de neurônios, a rede neural que obteve melhor desempenho foi a que apresentou três camadas, com 15 neurônios cada, função de ativação *logsig* e algoritmo de treinamento de Levenberg-Maquardt, convergindo com um erro de 10^{-6} em apenas 78 iterações. O ajuste entre os dados experimentais e os dados inferidos pela rede resultaram em um coeficiente de regressão (R^2) de 0,9999. Assim, a rede foi eficiente e foi capaz de cumprir sua função de sensor virtual da composição de topo do EB na segunda coluna de destilação da planta.

Quanto à aplicação do controle, a estratégia de controle que utiliza a medição inferida pela rede neural mostrou-se a mais eficiente, apresentando menor tempo de estabilização e menor porcentagem de *overshooting*. Desta forma, o controle inferencial do sensor virtual provou ser a alternativa viável para implantação da metodologia no processo industrial de produção do composto etilbenzeno, oferecendo agilidade na resposta ao sistema e menor custo de instalação e manutenção quando comparado à outras alternativas tradicionais.

6.0 BIBLIOGRAFIA

AGUIRRE, L.A. **Introdução à identificação de sistemas: técnicas lineares e não-lineares aplicadas a sistemas reais**. Belo Horizonte: Editora UFMG, Cáp 4 e 11 da 2ª Ed. 2004.

AZEVEDO, Edmundo Gomes de; ALVES, Ana Maria. **Engenharia de processos de separação**. Editora: IST – Instituto Superior Técnico. Edição Internacional, 2ª Edição, 2013.

CAMPOS, M. M.; SAITO, K. **Sistemas inteligentes em controle e automação de processos**. Rio de Janeiro: Editora Ciência Moderna Ltda., 2004.

CHAO, K. C.; SEADER, J. D. **A generation correlation of vapor-liquid equilibria in hydrocarbon mixture**. Alche, 598-605, 1961.

DISTEFANO III, J.J.; STUBBERUD A. R.; WILLIAMS, I. J. **Sistemas de Controle**. 2 ed. Nova York: Bookman, 2014.

FORTUNA L., GRAZIANI S., XIBILIA M. G. **Soft sensors for product quality monitoring in debutanizer distillation columns**. CONTROL ENGINEERING PRACTICE, V.13(4), 499-508, 2005.

FORTUNA, L.; GRAZIANI, S.; RIZZO, A.; & XIBILIA, M.G. **Soft sensors for monitoring and control of industrial processes**. London, UK: Springer, 2007.

GEANKOPLIS, C. J., **Transport Processes and Unit Operations**. Prentice-Hall International, Inc. 3rd ed. 1993.

GOMIDE, R. **Operações Unitárias IV**. 1 ed. São Paulo, SP, 1988.

GOMES, G. S. **Novas funções de ativação em redes neurais artificiais multilayer perceptron**. 2010. Tese de doutorado – UFPE, Pernambuco.

HAYKIN, S. **Redes neurais: princípios e prática**. 2ª Edição, Bookman, 2001.

HAYKIN, S. **Neural Networks: a comprehensive foundation**. 2 ed. Prentice Hall: Nova Jersey, 2011.

HIMMELBLAU D., “**Accounts of Experiences in the Application of Artificial Neural Networks in Chemical Engineering**”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 47, 5782-5796, 2008.

HOHAVI, R., DOUGHERTY, J., SAHAMI, R. **Supervised and Unsupervised Discretization of Continuous Features**. *Proceedings 12th International Conference Machine Learning*, pp. 194–202. 1995.

JANG, J. S. R., Sun, C. T., Mizutani, E., 1997. **Neuro-Fuzzy and Soft Computing: a computational approach to learning and machine intelligence**. Prentice-Hall, Inc.

KORETSKY, MILO D. **Engineering and Chemical Thermodynamics**. Ed. John Wiley & Sons, 2nd Edition, 2013.

LEVENBERG, K. **A method for the solution of certain non-linear problems in least squares**. *Quarterly of Applied Math*, Providence, v. 2, p. 164-168, 1944.

LUYBEN, W.L., **Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers**. 2 ed. Mc Graw-Hill Company, 1989.

LUYBEN, W. L, **Distillation Design and Control Using Aspen™ Simulation**. 2 ed. AIChE, 2013.

LUYBEN, W. L. **Practical distillation control**. Ed. Van Nostrand Reinhold. 1st Edition, 1992.

LUYBEN, W. L. **Process modeling, simulation and control for chemical engineers**. Editora: McGraw – Hill International Editions, 2ª Edição, 1999.

MARIZ, P. R. A.; VIEIRA, E. F. L; SANTOS, J. L. M. S.; PEDRO, M. S.; BRANDÃO, W. Y. A; ROJAS, L. O. A.; MORAIS JR, A. A. **Composition control by temperature inference using fuzzy controllers in the ethylbenzene productive process**. CILAMCE, 2017.

MARIZ, P. R. **Estratégias de controle inferencial utilizando controladores lógico *fuzzy* aplicados em uma planta de produção de etilbenzeno.** Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade Federal da Paraíba, 2017.

MARQUARDT, D. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. **Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics.** Vol 11, nº2, p. 431-441, 1963.

MORAIS JR, A. A., **Elaboração de um analisador virtual utilizando sistema híbrido neuro-fuzzy para inferenciar a composição em um processo de destilação.** Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Alagoas, 2011.

MORAIS JR, A. A. **Notas de Aula da disciplina de instrumentação e controle de processos.** Departamento de Engenharia Química, UFPB, 2016.

PÁDUA, A. B. **Redes neurais artificiais: teorias e aplicações.** Editora Livros Técnicos e Científicos, 2000.

PONCE, H. U. **Perceptrón Multicapa para Reconocimiento de Objetos sobre Planos.** 2004. Trabalho de Conclusão de Curso - Universidad de las Américas Puebla, Puebla.

SEADER, J. D., HENLEY, E. J., ROPER, H. D., **Separation process principles: chemical and biochemical operations.** John Wiley & Sons, Inc. 3rd edition, 2011.

SILVA, I. N.; SPATTI, D. H.; e FLAUZINOR, R. A. **Redes neurais artificiais para engenharia e Ciências aplicadas: curso prático.** São Paulo, Editora Artliver, 2010.

SMITH, C. A, Corripio, A. B., **Princípios e prática do controle automático de processo.** Rio de Janeiro. LTC, 2012.

SMITH, J. M.; VAN NESS; H. C.; and ABBOTT, M. M. **Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics.** McGraw-Hill Education, 7 edition, 2007.

VIEIRA, E. F. L; MARIZ, P. R. A.; SANTOS, J. L. M. S.; PEDRO, M. S.; BRANDÃO, W. Y. A; ROJAS, L. O. A.; MORAIS JR, A. A. **Composition inference using neural networks and inferential control in the ethylbenzene process.** CILAMCE, 2017.

